



**ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DA SEDIMENTAÇÃO DE UM  
AGREGADO DE PARTÍCULAS EM UM FLUIDO VISCOSO**

**Wilber Oliveira Cerqueira**

**TRABALHO DE GRADUAÇÃO  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**FACULDADE DE TECNOLOGIA  
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA**

---

Universidade de Brasília  
Faculdade de Tecnologia  
Departamento de Engenharia Mecânica

**ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DA SEDIMENTAÇÃO DE UM  
AGREGADO DE PARTÍCULAS EM UM FLUIDO VISCOSO**

**Wilber Oliveira Cerqueira**

Trabalho final de graduação submetido ao Departamento de Engenharia Mecânica da Faculdade de Tecnologia da Universidade de Brasília, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Mecânico.

**APROVADA POR:**

---

**Prof. Rafael Gabler Gontijo, DSc. (ENM-UnB)**  
(Orientador)

---

**Prof. Francisco Ricardo Da Cunha, Phd. (ENM-UnB)**  
(Examinador Interno)

---

**Prof. Sara Mauá Malvar, MSc. - (UDF)**  
(Examinador Externo)

**Brasília/DF, Julho de 2015.**

## **AGRADECIMENTOS**

Gostaria de agradecer a todos que me acompanharam ao longo dessa longa jornada.

Obrigado a todos.

## RESUMO

O presente trabalho consiste na realização de um estudo científico detalhado acerca da dinâmica evolutiva de um agregado de partículas esféricas imersas em um fluido base Newtoniano. Presume-se ao longo de todo o trabalho que o escoamento induzido pelo movimento de sedimentação das partículas se desenvolve no limite de baixo número de Reynolds. A ferramenta computacional utilizada consiste em uma plataforma acadêmica desenvolvida em linguagem Fortran denominada SIMS. Este programa foi desenvolvido no Grupo Vortex - Mecânica dos Fluidos de Escoamentos Complexos, da Universidade de Brasília. Em paralelo ao trabalho numérico realizado, verificou-se experimentalmente a simulação numérica desenvolvida. Foi realizada toda caracterização dos componentes utilizados no experimento bem como Do ponto de vista físico, considera-se que as partículas podem estar sujeitas à interações hidrodinâmicas de longo alcance. O código SIMS permite também a aplicação de um campo magnético externo, além do estudo de problemas de reologia e sedimentação. Neste trabalho, considera-se que as partículas são monodispersas e suficientemente grandes para que não estejam sujeitas a movimento Browniano. O foco do presente estudo consiste no estudo e desenvolvimento de ferramentas estatístico-matemáticas para que estudos físicos mais detalhados relacionados à formação, quebra e alterações topológicas de agregados possam ser desenvolvidos.

**Palavras-chave:** Fluido viscoso, agregado, interações hidrodinâmicas, interações magnéticas, campo externo, baixo Reynolds, SIMS.

## ABSTRACT

This work consists in carrying out a detailed scientific study of the evolutionary dynamics of an aggregate of spherical particles immersed in a Newtonian base fluid. It is assumed throughout the work which the flow induced particle sedimentation movement develops in the lower limit number of Reynolds. The computational tool used consists of an academic platform developed in Fortran language called SIMS. This program was developed in Group Vortex - Flows Complex Fluid Mechanics at the University of Brasilia. From the physical point of view we considered that the particles may be subject to hydrodynamic interactions and far-reaching magnetic. The code SIMS also allows the application of an external magnetic field, and the study of the rheology and sedimentation problems. In this work we considered that the particles are monodisperse and large enough so that they are not subject to Brownian motion. The focus of this research is the study and development of statistical and mathematical tools so that more detailed studies related to physical training, breaks and topological changes of aggregates can be developed.

**Keywords:** Viscous fluid, aggregate, hydrodynamics interactions, magnetic interactions, foreign shield, low Reynolds, SIMS.

## Sumário

<b>Sumário</b>	<b>i</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>iii</b>
<b>Lista de tabelas</b>	<b>vi</b>
<b>Lista de símbolos</b>	<b>vii</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1 Contextualização do tema . . . . .	1
1.2 Agregados . . . . .	3
1.3 Ferramentas matemático-estatísticas . . . . .	7
1.4 Microhidrodinâmica . . . . .	9
<b>2 OBJETIVOS DO TRABALHO</b>	<b>13</b>
<b>3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	<b>14</b>
3.1 Introdução as equações fundamentais da microhidrodinâmica . . . . .	14
3.2 Energia, linearidade, problemas de mobilidade e resistência . . . . .	15
3.3 A solução fundamental da equação de Stokes . . . . .	16
3.4 Formulação matemática para vários corpos submetidos a interações hidrodinâmicas . .	19
3.4.1 Interações hidrodinâmicas periódicas . . . . .	20
3.4.2 Células imagens . . . . .	21
3.4.3 Mobilidades hidrodinâmicas de Beenaker . . . . .	22
<b>4 FLUTUAÇÕES DE VELOCIDADE EM SISTEMAS PARTÍCULADOS</b>	<b>23</b>
4.1 Movimento Browniano . . . . .	23
4.1.1 Equação de Langevin . . . . .	24
4.1.2 Tipos de movimento Browniano . . . . .	24
4.2 Sedimentação de partículas monodispersas . . . . .	25

---

4.3	Partículas que pertencem ao agregado e escape de partículas - Descrição do algoritmo	27
4.4	Velocidade das partículas . . . . .	28
4.4.1	Velocidade média da suspensão em sistemas não-periódicos . . . . .	29
4.4.2	Velocidade média em sistemas periódicos . . . . .	29
4.5	Posição do centro de massa do agregado . . . . .	29
4.6	Razão de anisotropia do agregado . . . . .	32
4.7	Dimensão fractal do agregado . . . . .	32
4.8	Formação do agregado . . . . .	33
4.9	Descrição da função distribuição de probabilidade do número de partículas por agregado	35
4.9.1	Distribuição Gaussiana . . . . .	36
4.9.2	Conjunto de partículas . . . . .	37
4.10	Função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade . . . . .	37
4.11	Média e variância . . . . .	38
<b>5</b>	<b>ESTRUTURA DO CÓDIGO SIMS</b>	<b>40</b>
5.1	Simulação da sedimentação de um agregado de partículas em um fluido viscoso ( $Re \ll 1$ )	40
5.1.1	Arquivo principal . . . . .	40
5.1.2	Arquivo Funções . . . . .	41
<b>6</b>	<b>DIAGRAMA DE BLOCOS</b>	<b>46</b>
<b>7</b>	<b>UM ESTUDO PRELIMINAR PARA UM AGREGADO NÃO MAGNÉTICO</b>	<b>48</b>
<b>8</b>	<b>DESCRIÇÃO DOS ALGORITMOS DESENVOLVIDOS</b>	<b>53</b>
8.1	Algoritmo para a contagem de partículas que escapam do agregado . . . . .	53
8.2	Algoritmo de identificação das partículas que não pertencem ao agregado . . . . .	56
<b>9</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>57</b>

## Lista de Figuras

1.1	Balanco de forças em uma esfera imersa em um fluido viscoso. . . . .	2
1.2	Imagens dos tipos de agregados gerados pelo algoritmo implementado. Figura extraída do artigo científico “ <i>First passage calculation of the conductivity of particle aggregate-laden suspensions and composites</i> , Hogan Jr e Thajudeen (2011).” . . . . .	3
1.3	Imagens microscópicas de quatro partículas com (a) sem campo magnético aplicado e (b) com a presença de campo ao longo do eixo perpendicular a imagem; (c) e (e) casos sem o campo aplicado (forças gravitacionais determinam o eixo de rotação livre); (d) e (f) casos em que o campo é aplicado (forças gravitacionais determinam o eixo de rotação livre) e (g) é a função distribuição de probabilidade. <i>The effect of particle aggregate shape on ultrasonic anisotropy in concentrated magnetic fluids</i> , (2010). . . . .	5
1.4	Esquema da configuração experimental do sistema PIV. Figura extraída do artigo científico “ <i>Investigation and visualization of internal flow through particle aggregates and microbial flocs using particle image velocimetry - Feng Xiao, Kit Ming Lam, Xiao yan Li</i> , (2013).” . . . . .	6
1.5	Domínio computacional de simulação. Artigo científico “ <i>Three - dimensional CFD simulation of the flow field around and through particle aggregates</i> ”(2003). . . . .	6
1.6	A figura ilustra a disposição das malhas nas proximidades do agregado. Artigo “ <i>Mechanical load on a particle aggregate in mono-axial elongational flow</i> ” (2003). . . . .	7
3.1	A figura ilustra uma configuração de interação periódica (a), muitos corpos envolvendo decaimentos lentos. E uma configuração de interação não periódica (b), decaimentos mais rápidos. O gráfico na figura mostra o decaimento mais suave de $1/r$ em contraste com o decaimento mais acelerado de $1/r^3$ . Em que $r$ é a distância entre os corpos selecionados. . . . .	21
4.1	Ilustração de um movimento Browniano. . . . .	23
4.2	Distâncias das partículas para o centro do agregado. . . . .	28
4.3	Variação da velocidade média da suspensão em função de um número de partículas (a) e da fração volumétrica das partículas (b) para um sistema não periódico com interações hidrodinâmicas simples utilizando o tensor mobilidade de Rotne-Prager. Figura retirada da tese “ <i>Micromecânica e Microhidrodinâmica De Suspensões Magnéticas</i> ”(2013). . . . .	29

4.4	Variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas para uma fração volumétrica $\phi = 0.05$ . Os valores numéricos são comparados com a teoria assintótica de Batchelor (1972) e com as correlações empíricas de Richardson-Zaki (1954) e Brady-Durlofsky(1988). Tese "Micromecânica e Microhidrodinâmica De Suspensões Magnéticas"(2013). . . . .	30
4.5	Imagem capturada do agregado no instante inicial. Primeira zona, $t_s = 1[s]$ para uma fração volumétrica $\phi$ de 0,128. . . . .	31
4.6	Imagem capturada do agregado após o instante inicial. Segunda zona, $t_s = 2[s]$ para uma fração volumétrica $\phi$ de 0,128. . . . .	31
4.7	Imagem capturada do agregado após o instante inicial. Terceira zona, $t_s = 3[s]$ para uma fração volumétrica $\phi$ de 0,128. . . . .	31
4.8	Raios considerados para o cálculo da razão de anisotropia. . . . .	32
4.9	Razão de anisotropia $D_{ans} = -0,125$ para uma fração volumétrica de 0,159. Imagem obtida no experimento realizado no laboratório de mecânica dos fluidos da Universidade de Brasília - UnB . . . . .	33
4.10	A figura ilustra a configuração do agregado para uma fração volumétrica igual à $\phi = 0,128$ , com aproximadamente 1000 partículas. A dimensão fractal do agregado em questão pode ser obtida através da equação (4.29). . . . .	34
4.11	Formação da esteira para uma fração volumétrica $\phi$ de 0,128. Não foi possível capturar o centro de massa do agregado devido a limitações das máquinas disponíveis. Podemos observar a formação de alguns dímeros e trímeros na região central da figura. . . . .	34
4.12	Formação de microagregados para uma fração volumétrica $\phi$ de 0,128. Podemos observar a presença de dímeros, trímeros e outras formas de junção das partículas durante a sedimentação. . . . .	35
4.13	Geração de condições iniciais em laboratório com ligeiros desvios de uma condição totalmente randômica. Qualquer desequilíbrio seria suficiente para a quebra da randomicidade e por consequência medir a convergencia da variância de uma suspensão, tese "Micromecânica e Microhidrodinâmica De Suspensões Magnéticas" (2013). . . . .	39
7.1	Esquemática experimental da coluna de sedimentação. . . . .	48
7.2	Imperfeições superficiais presentes na esfera. . . . .	49
7.3	Diâmetro médio das partículas. . . . .	49
7.4	Imperfeições superficiais presentes na esfera. . . . .	50
7.5	Escape de partículas de um agregado sedimentando em um fluido viscoso. . . . .	51
7.6	Deformação do agregado. . . . .	52
8.1	Representação utilizada para a confecção da rotina. . . . .	54
8.2	A figura apresenta a lógica de funcionamento do código proposto. . . . .	54
8.3	Agregado com $N = 30$ partículas, submetido a ação da gravidade. . . . .	55

---

8.4	Representação das partículas que nestão fora do agregado. . . . .	56
9.1	Estrutura geral do código SIMS. . . . .	66
9.2	Estrutura do módulo funções do código SIMS. . . . .	67

## Lista de Tabelas

6.1	Simbologia - Diagrama de blocos . . . . .	47
-----	---	----

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\mathbf{u}$	Campo de velocidade Eurliano do fluido.
$\rho$	Massa específica.
$t$	Tempo.
$\frac{D}{Dt}$	Derivada material ou derivada total.
$p$	Campo de pressão.
$\nabla$	Operador gradiente.
$\mu$	Viscosidade dinâmica.
$\mathbf{g}$	Vetor gravidade.
$\phi$	Fração volumétrica de um agregado.
$n$	Fator geométrico.
$R$	Raio.
$C_d$	Coefficiente de arrasto.
$\rho'$	Massa específica ponderada.
$\rho_s$	Massa específica do material de uma esfera qualquer.
$\mathbf{w}$	Velocidade de sedimentação.
$d$	Diâmetro de uma partícula.
$\nu$	Viscosidade cinemática.
$\Delta$	Operador variação.

---

$N_p$	Número de partículas.
$K_f$	Fator pré-exponencial.
$R_g$	Raio de giração.
$D_f$	Dimensão fractal.
$A_p$	Raio.
$r_{din}$	Raio dinâmico.
$R_c$	Raio de colisão.
$D_w$	Trajectoria dimensional.
$D_{CCA}$	Dimensão fractal.
$\tau_{turb}$	Índice de turbidez.
$N$	Número de partículas.
$d_p$	Diâmetro de uma partícula.
$\lambda$	Comprimento de onda.
$Q$	Coefficiente de espalhamento.
$m$	Razão de índice de refração.
$g_r$	Função de distribuição radial.
$V$	Volume.
$\rho$	Massa específica.
$r$	Módulo do vetor posição.
$\dot{r}_i(t)$	Derivada da posição.
$\mathbf{g}$	Vetor gravidade.
$\mu_{ik}$	Trio translacional de matriz mobilidade.

---

$\Sigma$	Operador somatório.
$L$	Comprimento.
$\hat{f}$	Vetor força.
$\hat{u}$	Deslocamento virtual.
$\hat{\epsilon}$	Tensor virtual.
$\mathbf{F}^h$	Força hidrodinâmica.
$\mathbf{F}^e$	Forças externas.
$\mathbf{f}$	força por unidade de massa.
$\sigma$	Tensor de tensões.
$\mathbf{I}$	Matriz identidade.
$\mathbf{D}$	Soma do tensor simétrico com o tensor assimétrico.
$f'$	Termo de campo.
$x$	Espaçamento.
$\phi_d$	Taxa de energia dissipada por unidade de volume.
$\mathbf{e}$	Tensor genérico.
$\mathbf{n}$	Vetor normal.
$\mathbf{M}$	Matriz mobilidade.
$\mathbf{R}$	Matriz resistência.
$\nabla^2$	Operador Laplaciano.
$\mathbf{x}$	Vetor posição.
$\omega$	Velocidade angular.
$\mathbf{F}$	Vetor força.
$\hat{\mathbf{U}}$	Campo de velocidade no espaço.

---

$\mathbf{U}(\mathbf{x})$	Campo vetorial no espaço físico tridimensional.
$k$	Número de ondas.
$\mathbf{x}$	Espaço físico.
$\mathbf{G}$	Tensor de Ossen-Burgers.
$\mathbf{P}$	Campo de pressão de Ossen-Burgers.
$\mathbf{r}$	Vetor posição.
$\mathbf{T}$	Tensor de terceiro ordem.
$\mathbf{x}_0$	Ponto em que é gerado um distúrbio de velocidade.
$\mathbf{U}$	Velocidade escrita em função de um tensor.
$\mathbf{u}'$	Campo de velocidades.
$a'$	Raio de uma esfera.
$M$	Matriz mobilidade global.
$P_t$	Operador tensorial.
$D$	Difusividade da trajetória randômica.
$c$	Concentração de partículas.
$Pe$	Número de Peclet.
$\mathbf{q}$	Fluxo de partículas.
$T$	Temperatura.
$x_c$	Centro de massa na coordenada $x$ .
$y_c$	Centro de massa na coordenada $y$ .
$z_c$	Centro de massa na coordenada $z$ .
$m$	Massa.

---

$t_s$	Tempo de Stokes.
$D_{anis}$	Razão de anisotropia.
$\epsilon_{\acute{a}rea}$	Área projetada do agregado.
$k'$	Intensidade de flutuação de velocidade.
$V_{potencial}$	Força potencial.
$R(t)$	Função autocorrelação das flutuações de velocidades.
$\tau_c$	Tempo de correlação do sistema.
$v'^2$	Variância.
$\bar{v}$	Operador média.
$\mathbf{v}$	Vetor velocidade.
T	Distância entre centros.

# CAPITULO 1

## INTRODUÇÃO

### 1.1 Contextualização do tema

A configuração de um agregado de partículas imerso em um fluido é um campo de estudos que atualmente vem se tornando cada vez mais explorado, devido a riqueza de detalhes da mecânica de interação fluido partícula. Devido a esse fator, muitas teorias tem sido desenvolvidas a fim de investigar o comportamento de tal sistema nas mais diversas condições. O estudo de interações de partículas na presença de campo externo proporcionou avanços na biomedicina, Brusentsovet et al. (2008) exploraram o uso de um fluido magnético bio-compatível para o tratamento de tumores por uma técnica conhecida como magneto quimioterapia. Podemos ver assim a importância do estudo em tal área.

Trabalhos teóricos sobre a sedimentação de um agregado de partículas tiveram início com Brinkman (1947); Ooms, Mjinlieff e Beckers (1970) entre outros pesquisadores. As abordagens desses pesquisadores se basearam na solução da equação de Navier-Stokes para o escoamento externo ao agregado (considerando as condições de um escoamento em baixo número de Reynolds) e utilizar as equações de Darcy ou de Brinkman para o escoamento interno segundo Marco vanni (1999). O escoamento de um fluido incompressível e Newtoniano, é regido pela equação não linear de Navier-Stokes (1.1) que possui solução exata para casos muito particulares. Para o caso de escoamentos em que as proporções de forças inerciais e viscosas são pequenas, ou seja, baixo número de Reynolds ( $\lim \rightarrow 0$ ), o termo não linear da equação pode ser desprezado e então obtemos a equação de Stokes linear que descreve o campo de velocidade do sistema em questão.

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (1.1)$$

Em que considera-se ainda, A equação de Stokes e a condição de incompressibilidade na equação da continuidade

$$\mu \nabla^2 \mathbf{u} = \nabla p, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.2)$$

Em que  $\rho$  representa a massa específica do fluido base,  $t$  é o tempo,  $\frac{D\mathbf{u}}{Dt}$  denota a derivada total, que é a adição do termo de transporte com o termo derivativo no tempo, do campo de velocidade,  $p$  representa o campo de pressão do escoamento,  $\nabla$  é o operador gradiente,  $\mu$  a viscosidade e  $\mathbf{g}$  o vetor gravidade.

Importantes resultados podem ser obtidos em um escoamento com baixo número de Reynolds,

dos quais podemos citar a relação empírica de Richardson-Zaki (1954) que mostra que a velocidade média de sedimentação  $\mathbf{U}$  de um sistema de partículas com interações hidrodinâmicas que atuam nas mesmas é dado pela equação (1.2):

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_s \phi \left( \frac{R}{a} \right)^2, \quad (1.3)$$

em que  $\phi$  é a fração volumétrica das partículas,  $R$  é o raio de uma esfera imaginária,  $a$  o raio de uma partícula. Alguns autores especificam  $n$  como um fator geométrico para descrever a velocidade média de sedimentação em função da fração volumétrica do agregado. No caso da esfera,  $n$  vale 5.1. Esse valor pode ser fitado pela equação que descreve o coeficiente de arrasto de uma partícula (Ibad-zade (1992), Zegzhda (1934), Arkhangel'skii (1935) e Sarkisyan (1958)). O estudo de forças envolvidas é de extremo interesse em qualquer que seja o campo de estudo da engenharia. Conhecer forças e coeficientes provenientes do sistema em questão é essencial para a modelagem de um fenômeno físico. Dessa forma, o coeficiente de arrasto em escoamentos de baixo número de Reynolds torna-se uma importante variável a ser computada, a fim de ser possível determinar outros importantes parâmetros do sistema em questão. A equação (1.4) fornece o coeficiente de arrasto nesse tipo de escoamento (Nian-Sheng Cheng (1957)).

$$C_d = \frac{4}{3} \frac{\Delta\rho' \mathbf{g} d}{\mathbf{w}}, \quad (1.4)$$

Em que  $d$  é o diâmetro da partícula;  $\Delta\rho' = (\rho_s - \rho)/\rho$ , em que  $\rho_s$  é massa específica da partícula e  $\rho$  a do fluido;  $\mathbf{w}$  a velocidade de sedimentação da esfera dada por (1.5).

$$w = \frac{1}{18} \frac{\Delta\rho' \mathbf{g} d^2}{\nu}, \quad (1.5)$$

Sendo  $\nu$  é a viscosidade cinemática.

Através de um simples diagrama de corpo livre, podemos encontrar uma expressão para  $\mathbf{w}$ .

Considere a figura 1.1.

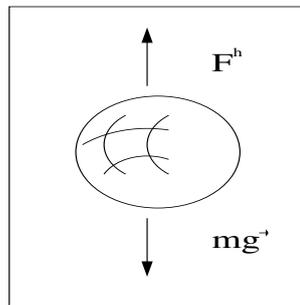


Figura 1.1: Balanço de forças em uma esfera imersa em um fluido viscoso.

$F^h$  é a força de fricção da lei Stokes dada pela equação (3.2) Na equação do movimento de  $F^h$  com a força peso tem-se

$$-6\pi A_p \mu \mathbf{v} = m\mathbf{g} \quad (1.6)$$

Em que  $A_p$  é o raio da partícula. Isolando a velocidade  $\mathbf{v}$  e considerando que a massa ( $m$ ) pode ser escrita como  $\rho V$  obtemos

$$\mathbf{v} = \frac{2\Delta\rho A_p^2 \mathbf{g}}{9\mu} \quad (1.7)$$

Provando assim a equação (1.5).

## 1.2 Agregados

Nesta seção realizou-se uma revisão bibliográfica relacionada a diversos estudos no contexto de dinâmica de agregados de partículas. O objetivo do estudo de Hogan. Jr e Thajudeen (2011), consistiu na utilização de uma simulação criada por Kim e Torquato (1992) para analisar computacionalmente os efeitos da morfologia quasefractal de redes na condutividade de sistemas de partículas carregadas. Através de uma combinação de simulação, (Filippov et al (2000)), permitiu-se obter uma geração randômica de um agregado quasefractal de propriedades de formação prescritas. A simulação combinada utiliza uma técnica desenvolvida por Kim e Torquato (1992) que apresenta resultados numéricos significantes ao estudo do agregado e que também serve para determinar subsequentemente a eficácia da condução de uma suspensão conhecendo a fração volumétrica do agregado quasefractal. Na figura 1.2 podemos observar a morfologia desses agregados.

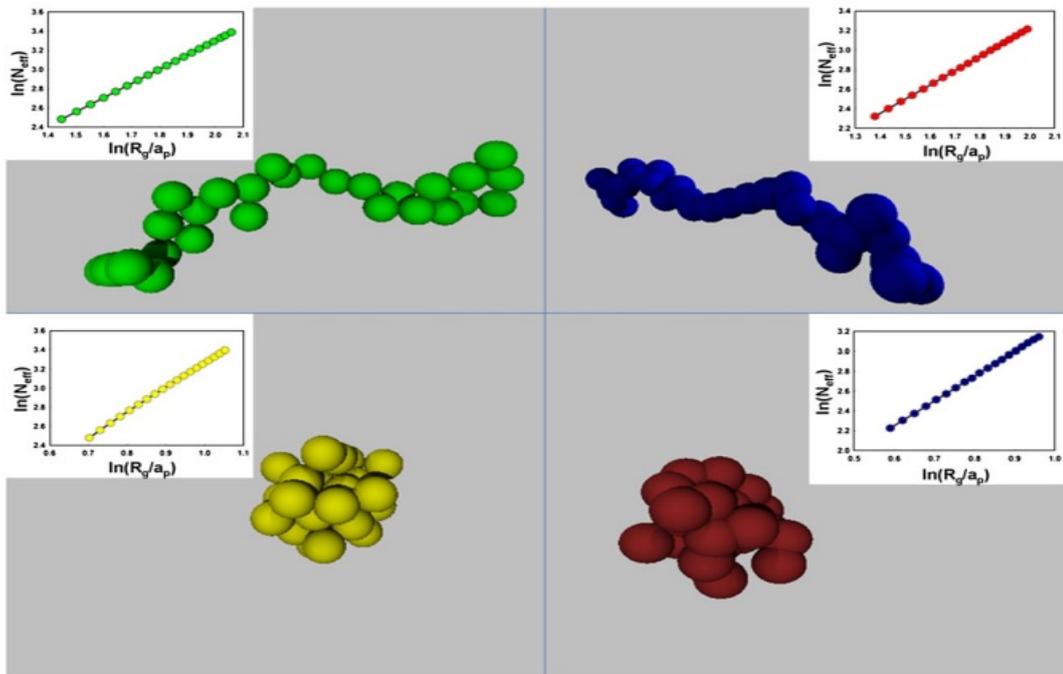


Figura 1.2: Imagens dos tipos de agregados gerados pelo algoritmo implementado. Figura extraída do artigo científico “*First passage calculation of the conductivity of particle aggregate-laden suspensions and composites*, Hogan Jr e Thajudeen (2011).”

Basicamente para gerar randomicamente os agregados quasefractais, utilizou-se o algoritmo sequencial descrito por Filippov et al. (2000). No algoritmo, primeiramente as partículas são adicionadas a um agregado pré-existente uma a cada instante de tempo, e em cada ponto do processo de geração a equação (1.8) é satisfeita:

$$N_p = K_f \left( \frac{R_g}{A_p} \right)^{D_f} \quad (1.8)$$

Onde tais parâmetros descritos por Filippov et al.(2000) em (1.8) são determinados:  $N_p$  é o número de partículas do agregado,  $D_f$  é a dimensão fractal,  $K_f$  é o fator pre-exponencial,  $R_g$  é raio de rotação.

A partir da simulação numérica da dinâmica de um agregado em um fluido viscoso Martynov e Tkach (2014) consideraram vários modelos de sedimentação de um agregado. O estudo realizado mostra que os resultados teóricos estão tanto qualitativamente quanto quantitativamente de acordo

com experiências relativas a dinâmica das partículas no agregado. Martynov e Tkach (2014) utilizaram os resultados obtidos por Baranov e Martyno (2004) e (2010) para criar um método em que a dinâmica de um agregado seja representada pela dinâmica de suas partículas constituintes com previsão para as forças de interação hidrodinâmica entre as partículas e as forças internas e restrições impostas para reter as partículas no agregado. Considerou-se o caso quando as partículas em um agregado se retêm numa posição particular e também estudou-se a dinâmica das partículas com potencial de interação par a par, (Konovalova e Martnov (2008) e Martnov e Tkach (2013)). Basicamente, utilizando as equações de movimento para cada uma das partículas prevendo as ações de todas as forças exercidas pelas outras, incluindo a hidrodinâmica e forças de interação, foi possível descrever a dinâmica do problema. Quando conveniente, são adicionadas às equações de movimento de rotação tendo em conta os torques experimentados pelas partículas. Para partículas agregadas de diferentes tamanhos, a sua velocidade angular é determinada a partir de uma análise puramente cinemática do problema.

Efeitos que a formação de bolhas pode causar na sedimentação de um agregado são significativos e, portanto, não podem ser desprezados. M.Ireland e Jameson (2014) documentaram, experimentalmente, os efeitos que bolhas flotando podem causar na sedimentação de um agregado de partículas. Durante a sedimentação do agregado a presença das bolhas que entram em contato com as partículas fazem com que as partículas presentes sejam carregadas pelas mesmas sendo que isso não submete-se a hipótese de um mecanismo de desprendimento, Klassen Mokrousov (1963), Falutsu (1994) e Seaman et al. (2006). Examinando em detalhes o movimento relativo da bolha e das partículas, obteve-se a razão para isto. A maior parte da energia cinética do agregado crescente foi dissipada durante as fases iniciais da colisão, quando as partículas estavam a ser empurradas para dentro ao invés de puxado para fora da bolha.

Hornowski et. al (2015) estudaram os efeitos de ultra-som na anisotropia dos modelos de agregado. Uma comparação foi realizada entre resultados experimentais e teorias descritas por Ahuja e Hendee (2012). O experimento consistiu no uso de várias partículas ferromagnéticas imersas em um fluido magnético que responde à presença de um campo externo.

O movimento Browniano das partículas é um modelo de estudo de mecanismos de difusão. Estudar esse movimento é algo fundamental em diversas áreas da ciência, como a química, física, biologia e outras. Tendo isso em mente, H. McNaughton et al. (2010) realizaram um experimento unidimensional de um sistema de rotação browniana em que a rotação livre se limita a um único eixo. Basicamente o experimento realizado consistiu em submergir partículas em um solução com água desionizada inseridas em um campo externo criado através de duas bobinas de Helmholtz a fim de controlar o movimento da partícula com uma faixa de campo de 0-1.4 [mT]. Uma aplicação potencial de limitar a rotação Browniana a uma dimensão é a capacidade de aferir a rotação difusiva sobre diferentes eixos. A figura 1.3 mostra a influência do campo aplicado a um eixo e sem a aplicação de um campo em um outro eixo de referência.

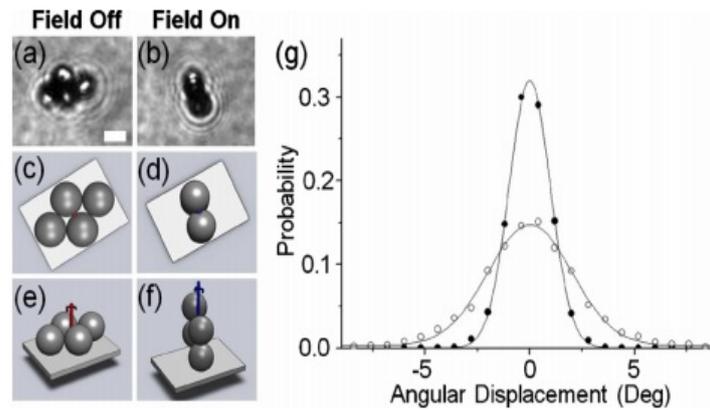


Figura 1.3: Imagens microscópicas de quatro partículas com (a) sem campo magnético aplicado e (b) com a presença de campo ao longo do eixo perpendicular a imagem; (c) e (e) casos sem o campo aplicado (forças gravitacionais determinam o eixo de rotação livre); (d) e (f) casos em que o campo é aplicado (forças gravitacionais determinam o eixo de rotação livre) e (g) é a função distribuição de probabilidade. *The effect of particle aggregate shape on ultrasonic anisotropy in concentrated magnetic fluids*, (2010).

Em síntese, o resultado obtido demonstra um método para lidar com o movimento Browniano de rotação de uma maneira controlada, sendo rigorosamente descritível pela formulação analítica de Einstein (1906) em contraste com rotação Browniana irrestrita. Sendo que o método experimental realizado no trabalho de McNaughton et. al (2010) influencia diretamente na formação e dimensão fractal do agregado, tendo em vista que o fluido base responderá a ação do campo magnético aplicado.

Em um outro estudo recente envolvendo o comportamento dinâmico de agregados, Kharaghani et al. (2012) estudaram um modelo de rede de poros irregular para a secagem convectiva de agregados aleatórios compostas de partículas primárias monodispersas.

Usando uma avançada forma de visualização de escoamento, o sistema PIV (particle image velocimetry), Xiao-yan Li et al.(2013) estudaram as propriedades hidrodinâmicas de grandes agregados em água. Com o objetivo de estudar o agregado e sua formação, trabalhos experimentais foram desenvolvidos dos quais podemos citar como exemplo a caracterização das partículas, inicialmente com um estudo analítico de Brinkman (1947) e logo após o de Adler (1981) estimativa do fluxo interno através de esferas porosas com base na lei de Darcy e na equação de Brinkman. Li et al. (2001) aplicaram um conceito de dimensionamento fractal e propôs uma estrutura de cluster para cluster para modelar a permeabilidade do agregado. Para tal trabalho, a configuração experimental utilizada ilustra-se na figura 1.4.

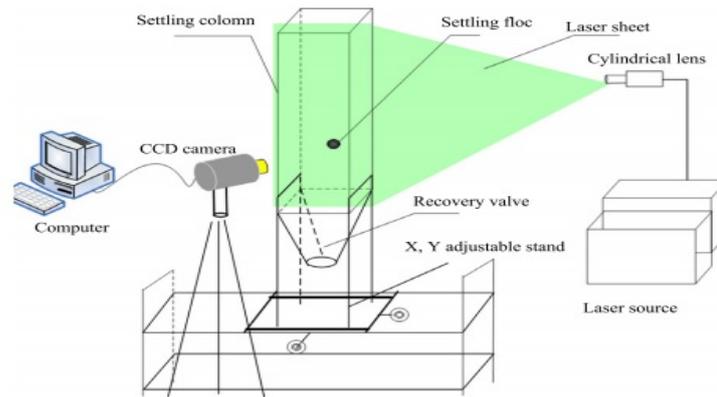


Figura 1.4: Esquema da configuração experimental do sistema PIV. Figura extraída do artigo científico “*Investigation and visualization of internal flow through particle aggregates and microbial flocs using particle image velocimetry - Feng Xiao, Kit Ming Lam, Xiao yan Li, (2013).*”

Através do sistema PIV, foi possível aferir dados como a velocidade terminal, aceleração e posição da partícula sedimentada ao longo da coluna.

Burdukova et al. (2010) estudaram os efeitos de temperatura no tamanho dos agregados formados de alumina. Os resultados foram discutidos com base nos efeitos da temperatura sobre a colisão de partículas, a adesão e desfragmentação de agregados. Na ausência de cisalhamento, o tamanho do agregado em uma suspensão é dado pela intensidade de atração/aderência (considerando que outros fatores tais como concentração de partículas são mantidas constantes); Adachi (1995) e Franks et al. (2010). O método experimental utilizado para realizar o objetivo proposto consiste no bombeamento de partículas através de um tubo de cobre submerso em um fluido com temperatura controlada, tais partículas foram despejadas em um recipiente com temperatura controlada.

Métodos computacionais que utilizam geração de malha em softwares avançados específicos para a área de mecânica dos fluidos são usados frequentemente para simulações de escoamentos. No caso do agregado, simulação em baixo número de Reynolds é o foco principal. Xiao et al. (2013), através de um método numérico computacional, estudaram as propriedades hidrodinâmicas do campo de escoamento em torno de um agregado fractal. Utilizando o software comercial GAMBIT 2.3.16 o estudo do agregado foi realizado conforme a configuração observada na figura 1.5.

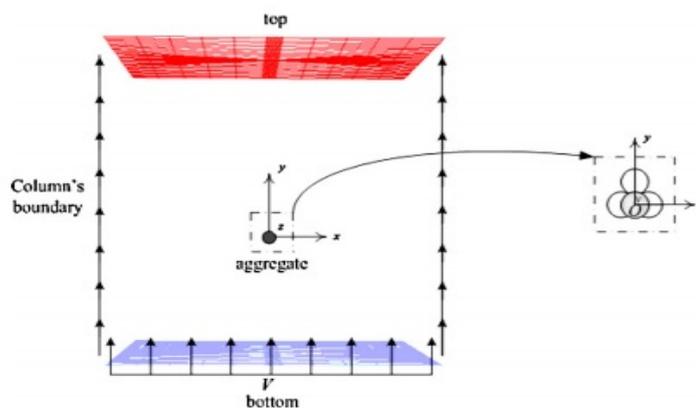


Figura 1.5: Domínio computacional de simulação. Artigo científico “*Three - dimensional CFD simulation of the flow field around and through particle aggregates*”(2003).

Sendo a forma do agregado e o campo de escoamento definido, a geração de malha foi realizada. A fim de resolver os pontos de contato entre as esferas de grupos principais, a malha tetraédrica foi confeccionada. As ferramentas disponíveis no GAMBIT foram usadas para consertar e preparar o geometria para uma malha de alta qualidade.

Ainda nesse contexto computacional, Hartmann e Delgado (2003) realizaram simulações numéricas dos efeitos de um campo de alongamento do escoamento de suspensão de agregados de partículas. Considerando o escoamento de baixo Reynolds, a distribuição de velocidade e pressão são obtidas numericamente pelas equações de Navier-Stokes e através da equação da continuidade baseada em métodos de diferenças finitas. O movimento das partículas é obtida a partir da equação de Euler de movimento para corpos rígidos. As equações governantes são resolvidas com um esquema de volumes finitos de célula centrada. As derivadas espaciais são aproximadas por diferenças centrais de precisão de segunda ordem. A forma de integração no tempo é a forma de Crank-Nicholson. O sistema de equações discretas é resolvido usando a direção alternada método implícito DDA, Marchuck (1982), e reforçada pelo método GMRES; Saad e Schultz (1986). A sobreposição de partículas em três dimensões é aplicada para discretizar a geometria do agregado.

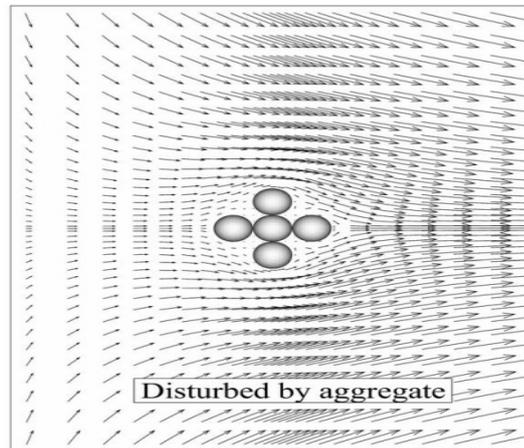


Figura 1.6: A figura ilustra a disposição das malhas nas proximidades do agregado. Artigo "*Mechanical load on a particle aggregate in mono-axial elongational flow*" (2003).

### 1.3 Ferramentas matemático-estatísticas

Essa seção do presente relatório dedica-se ao estudo bibliográfico de ferramentas matemático-estatísticas que são utilizadas para a caracterização do agregado.

Para tanto, a dimensão fractal de um agregado é uma propriedade física que diz respeito à forma do mesmo. Alguns fatores influenciam modificações nesta propriedade. Pode-se citar como exemplo o trabalho de Lech Gmachowski (2010), que estudou a dimensão fractal do agregado formada no regime de sedimentação. A dimensão fractal de um agregado pode ser determinada a partir da relação massa-raio descrita em (1.9). A trajetória dimensional do agregado depende da dimensão fractal do aglomerado computada na equação (1.10).

$$\frac{r}{R_c} = \sqrt{1.56 - \left(1.228 - \frac{3}{2 + D_w}\right)^2} - 0.228, \quad (1.9)$$

Onde  $r$  é o raio dinâmico do agregado;  $R_c$  é o raio de colisão e  $D_w$  é a trajetória dimensional do

agregado.

e

$$2 \frac{D_{CCA} - 1}{D_{CCA}} = \frac{\sqrt{1.56 - (1.228 - \frac{3}{2+D_w})^2} - 0.228}{\sqrt{1.56 - (1.228 - \frac{D_{CCA}-1}{2})^2} - 0.228} \quad (1.10)$$

Onde  $D_{CCA}$  é a dimensão fractal do aglomerado.

Berg e Huang (2004) estudaram um agregado primeiramente estabilizado inicialmente e em seguida desestabilizado através do controle de temperatura. O resultado da dinâmica de dispersão de luz mostrou que a dimensão fractal do agregado juntamente com a taxa volumétrica aumentam conforme o aumento da temperatura. Observou-se então que o resultado está em contraste com o obtido quando um colóide electrostaticamente estabilizado é desestabilizada, ou seja, aqueles agregados que se formam mais rapidamente, resulta em uma menor dimensão fractal. Nesse trabalho, os autores explicam seus resultados basicamente em torno de efeitos de temperatura juntamente com o estudo de interações hidrodinâmicas. Esse estudo examina um colóide estabilizada num solvente não aquoso, onde nem efeitos de sal nem efeitos hidrofóbicos desempenham algum papel.

Métodos alternativos de interação fluido partícula em um agregado estão sendo constantemente explorados no sentido de tornar mais interessante o estudo de um agregado. Aplicação de ultra-som em fluidos mágnéticos bem como a eletrofloculação, são apenas exemplos desses métodos alternativos. Hornowski et. al (2015), verificaram os efeitos de um ultra-som na anisotropia de um modelo de agregado através de análise numérica e experimental. Mostrou-se também, através de simulações, que os agregados da cadeia ( $h = b/a \gg 1$ ;  $a$  e  $b$  sendo comprimentos de eixo menor e maior, respectivamente) são mais visível em ferrofluidos diluídos enquanto que os ferrofluidos densas são caracterizadas por um mais homogênea gota ( $h = b/a > 1$ ) estrutura.

A eletrofloculação (EF) está se tornando reconhecida como um processo alternativo para convencional coagulação (passagem de um líquido ao estado sólido) e floculação (aglutinação em focos), embora ambos sejam um pouco diferentes. Harif e Adin (2007), estudaram o comportamento de uma célula EF submetida a baixa corrente elétrica juntamente com o efeito de um campo induzido pela passagem de uma corrente induzida. Os autores observaram uma correlação linear entre o tamanho dos focos e dimensões fractais inferiores foram obtidas para tamanhos maiores de focos. As dimensões fractais dos focos obtidos no EF são em média inferiores aos reportados para convencional coagulação.

Mensurar a dimensão fractal de um agregado é fundamental no estudo do mesmo. Gmachowski e Paczusi (2011) apresentaram um método de determinar a dimensão fractal de um agregado. Através de um sensor de turbidez, ambas as velocidades de sedimentação e a de turvação (distúrbio) da suspensão são determinadas. Considerando a turvação do sistema de um agregado monodisperso, a equação (1.11) nos fornece a turbidez do sistema.

$$\tau_{turb} = N \frac{\pi d_p^2}{4} Q(d_p, \lambda, m) \quad (1.11)$$

Em que  $Q$  é o coeficiente de espalhamento e depende do diâmetro da partícula  $d_p$ ,  $\lambda$  o comprimento de onda e  $m$  é a razão do índice de refração do sólido e do líquido.

A velocidade de sedimentação, equação (1.5), de um agregado pode ser determinada pelo equilíbrio da força gravitacional para permitir a flutuabilidade do circundante de fluido com a força hidrodinâmica oposta, que depende do tamanho do agregado e a sua permeabilidade.

É necessário conhecer as propriedades das partículas que compoem uma suspensão. Uma configuração monodispersa apresenta razão de anisotropia diferente de uma configuração polidispersa por exemplo. Pyanzina et. al (2010) apresentaram teorias e resultados de simulações sobre o fator de estrutura de mono e bidispersa ferrofluidos com cadeias de agregados, tanto com e sem um campo magnético externo aplicado. A cadeia de distribuição é obtida pela teoria funcional da densidade (DFT). A função de distribuição radial (FDR ou  $RDF$ ) é calculada diretamente a partir da cadeia de distribuição e com a transformada de Fourier para calcular o fator de estrutura.

A aproximação adotada para calcular a FDR ou RDF e a FE para determinar o potencial de interação entre as partículas de um agregado é muito diferente daquela que é adotada para obter suas propriedades fractais. A RDF é dado por

$$g(r) = \left(\frac{V}{N}\right)^2 n_{correl}^{(2)}(r) \quad (1.12)$$

Em que  $g(r)$ , que é normalizada a 1 para  $r \rightarrow \infty$ , mostra a distribuição efetiva de partículas localizadas a uma distância  $r$  em torno de uma outra partícula situada na origem. O número de partículas  $dN(r)$  entre  $r$  e  $r + dr$  é dado por  $dN(r) = 4\pi(N/V)r^2 dr$ . O número de partículas  $N(r)$  que está dentro de uma esfera de raio  $r$  é

$$N(r) = \frac{N}{V} \int_0^r g(r) 4\pi r^2 dr, \quad (1.13)$$

Em que  $r$  é o raio de uma esfera definida como contorno do agregado e  $dr$  é um diferencial do raio.  $N$  número de partículas e  $V$  o volume ocupado pelas partículas.

O estudo da razão de anisotropia está relacionado a frequência com que um determinado agregado de partículas deixa o centro de massa. Soos et. al (2009), verificaram, experimentalmente, o rompimento de agregados densos em um fluxo extensional. O escoamento foi impulsionado por bombeamento das suspensões com os agregados através de um bocal contratante. Dessa forma, a variação da massa dos aglomerados distribuição durante o processo de ruptura foi medido pelo pequeno ângulo de dispersão da luz.

Rani e Biswas (2014) estudaram uma forma de aborgadem generalizada para o cálculo da distribuição radial de água de hidratação, de modelos assimétricos em proteínas. A superfície e a função distribuição radial foi analisada em três grupos de proteínas globulares de alta resolução e proteínas nanoglobular. Os autores observaram que os picos para RDF normalizada são encontrados mais acentuados em comparação para os de água bruta.

A equação analítica de forma fechada com base teoricamente para a função de distribuição radial,  $g(r)$ , de um fluido de esferas duras pode ser utilizada para obter uma representação exata analítica, (Trokhymchuk et. al (2005)). O método faz uso de uma expressão analítica para os de curto e de longo alcance comportamentos de  $g(r)$ , ambos obtidos a partir da equação Percus-Yevick, em combinação com a restrição de consistência termodinâmica.

## 1.4 Microhidrodinâmica

Essa seção é reservada ao estudo de interações microhidrodinâmicas do agregado. Aqui foi feita uma vasta revisão bibliográfica sobre o assunto, a fim de que os conceitos básicos e mais complexos de microhidrodinâmica pudessem ser utilizados em subrotinas explorados do código SIMS.

O comportamento de fluidos complexos, tais como dilatantes (fluidos que se tornam mais viscosos quando cisalhados) ou soluções poliméricas semi-dilatantes, suspensões coloidais e microemulsões são fortemente afetadas, e até mesmo dominadas, por interações hidrodinâmicas (Mussawisade e Gompper (1990)). Notar tais interações não é uma tarefa complexa, devido a taxa de decaimento dessas forças que são caracterizados como de longo alcance e dependente de  $1/r$  onde  $r$  é a distância entre corpos. Forças e torques tanto hidrodinâmicos como magnéticos e presença de campos externos são mecanismos de interação das partículas com o fluido em questão. Torques magnéticos e forças magnéticas decaem respectivamente com  $1/r^3$  e  $1/r^4$  que podem ser consideradas interações com decaimento mais rápido e que em alguns casos podem dispensar uma análise periódica de tais interações, (Gontijo e Cunha (2015)). Os eventos descritos são considerados no código SIMS (Gontijo (2013)) e tornam mais interessante o estudo do comportamento do agregado.

Ekiel-Jezewska e Wajnryb (2011) apresentaram resultados sobre o estudo de interações dinâmicas e como tais interações mudam se forem usadas esferas ao invés de partículas para a sedimentação. O método de desenvolvimento consistiu em utilizar 3 esferas que sedimentam em um fluido infinito (efeitos de parede desprezados) de alta viscosidade no qual a força gravitacional atuante faz com que a partícula possa sedimentar. O trabalho também consistiu em verificar se a lubrificação também deve ser considerada.

Através da equação (1.14) obtemos o movimento translacional da partícula no fluido.

$$\dot{r}_i(t) = \sum_{k=1}^3 \mu_{ik} \cdot \mathbf{g} \quad (1.14)$$

Onde  $\mu_{ik}$  é o trio translacional de matriz mobilidade (Kim e Karrila (1991) e Felderhof (1988)) e  $\mathbf{g}$  é o vetor gravidade.

A equação 1.14 é uma equação ordinária de primeira ordem e apresenta solução para todos os centros das partículas sendo fornecida a posição inicial. No trabalho em questão as partículas não tem seu momento angular avaliado, pois o foco é a dinâmica do centro da partícula e como podemos da partícula não depende da velocidade de rotação ou de orientações iniciais, ou seja, podendo ser resolvido para uma condição inicial arbitrária. Como a equação 1.14 é uma função do tempo, a condição inicial,  $t = 0$ , foi definida de tal forma que as esferas estão dispostas colinearmente e assim, utilizando ferramentas computacionais, o programa que dispõe de métodos numéricos para resolver equações ordinárias, foi capaz de obter parâmetros como velocidade e posição das partículas. Para uma configuração instantânea as três esferas foram avaliadas pela expansão multipolar; Felderhof(1994); e numericamente implementada em *Hydromultipole*, Cichocki(1999).

A microhidrodinâmica não está presente apenas em estudo de sedimentação. Podemos observar que em áreas como a biologia, por exemplo, abrange conceitos de microhidrodinâmica. Simons et al. (2015) focaram seus trabalhos em descrever a interação do flagelo de um espermatozoide com um fluido viscoso. Modelou-se o flagelo de um espermatozoide como uma curva tridimensional que exerce forças ao longo de seu comprimento em um fluido viscoso governado pelas equações incompressíveis de Stokes (1.15)

$$\mu \Delta \mathbf{U} = \nabla p - \int_0^L \mathbf{f}(\mathbf{X}(s, t), t) \phi_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds \quad (1.15)$$

Onde  $L$  é o comprimento total do flagelo,  $s$  é o comprimento do arco,  $t$  é o tempo,  $\mu$  a viscosidade

dinâmica do fluido base,  $\mathbf{u}$  a velocidade do fluido e  $P$  a pressão. As forças externas  $\mathbf{f}$  exercidas pelo flagelo sobre e em torno do fluido são regularizadas pela função de bolha  $\phi_\epsilon$  sendo essa regularizada por uma função delta que distribui a força em um pequeno volume de fluido em torno da curva, Cortez (2001).

O modelo de estudo aqui apresentado assume que o flagelo do esperma tem uma batida quase planar. Os tipos de movimentação helicoidal e planar, ambos podem ser estáveis. Sendo de extrema importância o estudo das forças, estas são derivadas usando a formulação de energia contínua que é uma extensão do modelo de filamentos atuados internamente, (Fauci e Peskin (1988)). O método utilizado para calcular as posições flagelares, forças e velocidades consiste em um algoritmo que basicamente calcula o centro de massa dos flagelos e traduz os dados para que eles tenham o centro de massa na origem arbitrariamente escolhida; utiliza o método dos mínimos quadrados para encontrar o plano flagelar para o flagelo centrado, sendo o vetor normal ao plano representado por  $V_j$ ; determina um passo de tempo; o vetor posição é definido usando o plano referência determinado pelo vetor normal; encontra as forças para o vetor posição baseado na relação força e energia observada na equação (1.16); rotaciona as forças derivativas da energia (versor) de volta para a o plano de referência para se obter o vetor força.

$$\hat{\mathbf{f}} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \hat{\mathbf{X}}} \quad (1.16)$$

A hidrodinâmica de corpos delgados flexíveis no escoamento de Stokes é estudada tendo em mente as interações fluido-estrutura através de forças e momentos combinados. O fluido, sujeito a linha de fonte de força e momentos, pode ser caracterizado por meio de equações integrais enquanto a flexão de corpos delgados pode ser caracterizada por meio de elementos finitos. Tendo isso em mente, Jiang e Yang (2013) introduziram um método de elemento de contorno de ordem superior a fim de estudar efeitos elásticos da hidrodinâmica de flexão de corpos delgados no escoamento de Stokes que considera as ações de forças resultantes e momentos binários. O trabalho consistiu em sumarizar a integral de linha da equação para o escoamento de Stokes sobre cavidade delgada recentemente derivada; Jiang et al.(2014). Adicionalmente sumarizou-se o clássico modelo de corpo delgado flexível (*Slender body theory*) utilizando elementos finitos. Condições interfaciais entre o fluido e o sólido.

Imai et al. (2014) realizaram pesquisas sobre a migração lateral de uma capsula esférica perto de uma parede plana em um escoamento de Stokes, utilizando o método de integrais de contorno que é especialmente adequado para esse tipo de problema. A membrana da cápsula esférica é considerada bidimensional e isotrópica, de material hiperelástico com um módulo de cisalhamento especificado e negligenciando a resistência a flexão. O método numérico utilizado no estudo foi baseado no método desenvolvido por Walter et. al (2010) e sua subsequente aplicação na unidade de processamento gráfico por Matsunaga et. al (2014). A discretização da membrana foi feita por geometrias triangulares e para cada passo de tempo a tensão foi determinada em cada uma usando a função de energia de deformação dada em funções detalhadamente estudadas pelos autores. A tensão na membrana é acoplada à tensão no fluido via elementos finitos. A forma fraca de equilíbrio entre a tensão na membrana e a tensão e a carga normal viscosa sobre a membrana é dada por  $\mathbf{q} = [\boldsymbol{\sigma}_{out} - \boldsymbol{\sigma}_{in}] \cdot \mathbf{n}$ . Em que  $\mathbf{n}$  é o vetor normal a superfície,  $\boldsymbol{\sigma}_{out}$  e  $\boldsymbol{\sigma}_{in}$  são tensores. Vale ressaltar que para aferir a deformação da cápsula a razão de anisotropia de Taylor, Taylor (1964), foi utilizada como ferramenta de análise.

$$\int_A \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{q} dA = \int_A \hat{\boldsymbol{\epsilon}} : \mathbf{T} dA \quad (1.17)$$

Sendo  $\hat{\mathbf{u}}$  o deslocamento virtual e  $\hat{\mathbf{e}}$  associado ao tensor virtual. Uma vez que o movimento do fluido da cápsula e em torno ocorre num fluxo de Stokes, a equação integral de contorno pode ser utilizado para se obter a velocidade do fluido diretamente. A velocidade num ponto  $x_0$  no fluxo é expresso em função de um vetor posição e das funções de Green. Para avançar a simulação para o próximo passo de tempo o método de Runge-Kutta de segunda ordem é utilizado. Considerando a presença da parede, devido ao desenvolvimento de pressão negativa entre a parede e o fundo da cápsula, a parte inferior da cápsula se torna alongada e mostra maior curvatura do que a frente da cápsula, levando à formação de uma forma de gota, como que rompe o ponto de simetria entre o centroide da cápsula. Então, como a cápsula migra para longe da parede, a extensão desta deformação assimétrica diminui.

O trabalho de Reddig e Stark (2013) consistiu no estudo da dinâmica não-linear de esferas que não se cristalizam, ou que possuem dificuldade de se cristalizar, e que possuem capacidade difusiva baixa sob a influência de um escoamento de pressão acionada em baixos números de Reynolds. Mostrou-se que o escoamento de Poiseuille, caso limitado, fornece novas trajetórias de migração. Metodologicamente, estudou-se o movimento de duas esferas coloidais idênticas submetida a pressão causada pelo escoamento de Poiseuille. Sendo que essas esferas se encontram entre duas placas paralelas separadas, com distância da mesma ordem de grandeza do diâmetro das esferas. Empregou-se a matriz mobilidade que incorpora a extensão multipolar das forças hidrodinâmicas agindo sobre a superfície das partículas e a correção de lubrificação. A disposição inicial das partículas é um parâmetro importante a ser considerado. Algumas importantes informações foram obtidas através do trabalho realizado como partículas que se movem em trajetórias limitadas oscilatórias não se separam, o que pode ter consequências significativas para os sistemas microfluidos.

Flekkey et al. (1995) trabalharam em artigos experimentais com um escoamento de Stokes dentro de uma célula de Hele-Shaw com um obstáculo. Comparando os experimentos com dois modelos numéricos independentes onde a deformação já é visível (em  $Re = 0,0006$ ) demonstrou-se que a irreversibilidade observado é devido ao efeito da força de inércia não-linear, isto é, de hidrodinâmica natural. Numericamente, determinou-se o campo de velocidade do escoamento ao redor do cilindro por meio das equações de Navier-Stokes em uma determinada posição  $r$  e em um determinado tempo  $t$ .

Este relatório apresenta resultados de um simulação numérica feita para o comportamento de um agregado de partículas sedimentando em um fluido viscoso. A simulação realiza Tratamentos estatísticos que variam de flutuações de parâmetros como velocidade do agregado e média de partículas que se desprendem deste. Resultados experimentais também serão discutidos ao longo do relatório e comparados com os resultados obtidos numericamente.

## CAPITULO 2

### OBJETIVOS DO TRABALHO

O principal objetivo deste trabalho é descrever o comportamento do agregado de partículas por meio de simulação numérica e implementar novas subrotinas no código SIMS. A descrição do comportamento consiste em caracterizar os seguintes elementos:

- Realizar uma extensa revisão bibliográfica sobre a microhidrodinâmica e ferramentas matematico-estatísticas utilizadas no código SIMS, para a compreensão e futuras implementações;
- Verificar a estrutura do código utilizado, SIMS, (Gontijo (2013)), para a simulação da sedimentação de um agregado em um fluido viscoso, bem como esquematiza-la de forma pragmática;
- Tratamento estatístico dos parâmetros físicos do agregado. Flutuações, médias e variâncias de velocidade das partículas;
- Criar novas subrotinas para otimizar o código, como por exemplo, escape de partículas do agregado e identificação das partículas que escaparam do agregado. Utilizar essas subrotinas implementadas para facilitar o trabalho experimental realizado.

Por fim, obter resultados numéricos através do código e compará-los com os resultados obtidos experimentalmente na primeira etapa deste projeto. Os resultados serão comparados a fim de se validar as subrtinas implementadas, sendo que essas serão utilizadas para auxiliar o trabalho experimental do projeto. Ao longo deste relatório serão discutidas as divergências entre os resultados obtidos, bem como analisada as imprecisões nos métodos utilizados.

## CAPITULO 3

### FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

#### 3.1 Introdução as equações fundamentais da microhidrodinâmica

O presente trabalho tem como objetivo principal o estudo de interações microhidrodinâmicas e o estudo de ferramentas estatísticas que possam auxiliar o código SIMS no sentido de otimizá-lo e torná-lo o mais robusto possível. Com base nisso, a seção em questão traz conceitos fundamentais de microhidrodinâmica baseado na tese "Micromecânica e Microhidrodinâmica de Suspensões Magnéticas" Gontijo (2013) e nos livros Microhidrodinâmica de Kim e Karrila (2005), Colloidal Dispersions - Russel, Saville and Schowalter (1989), Mobile Particulate Systems - E. Guazzelli e L. Oger (1994), Statistical Microhydrodynamics - Sinaiski . Zaichik (2007) e Statistical Mechanics - McQuarrie, Donald A. (1976).

Considerando os dados e informações descritas na seção configuração experimental, a fundamentação teórica foi confeccionada.

Determinar a dinâmica de uma ou mais partículas em escoamentos de regiões limitadas e ilimitadas é o principal motivo do estudo de microhidrodinâmica. Desde que a inércia seja desconsiderada na microescala a força hidrodinâmica ( $F^h$ ) equilibra as forças externas ( $F^e$ ) fornecidas pela segunda lei de Newton, e de forma pragmática podemos escrever o equilíbrio conforme a equação (3.1)

$$\text{Dinâmica} \rightarrow \mathbf{F}^h = -\mathbf{F}^e \quad (3.1)$$

Onde

$$\mathbf{F}^h = -6\pi\mu A_p \mathbf{v} \quad (3.2)$$

Em que, para uma esfera, denominamos a lei de Stokes. Sendo  $A_p$  o raio da partícula e  $\mathbf{v}$  a velocidade da partícula.

O estudo de interações hidrodinâmicas no agregado tem sido alvo de estudo de muitos pesquisadores devido a riqueza de material de estudo fornecido à microhidrodinâmica. Quando falamos em sedimentação, para escoamento em baixos números de Reynolds, geralmente devido a alta viscosidade do fluido base e ao tamanho das partículas que geralmente são sedimentadas, conforme proposto experimentalmente, as equações que modelam o movimento do fluido são as equações de Stokes (3.3) e (3.4)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.3)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (3.4)$$

Considerando a equação de conservação do momento

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} \quad (3.5)$$

Em que  $\rho \mathbf{f}$  é força por unidade de massa. Para o caso de incompressibilidade e regime permanente o termo  $\frac{D\mathbf{u}}{Dt}$  é igual a zero devido a inexistência de variação da massa específica.

Temos que  $\boldsymbol{\sigma}$  é o tensor de tensões que para um fluido Newtoniano incompressível é dado pela equação (3.6)

$$\boldsymbol{\sigma} = -p \mathbf{I} + 2 \mu \mathbf{D} \quad (3.6)$$

Onde  $\mathbf{D}$  é o tensor taxa de deformação dado por (3.7)

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (3.7)$$

Substituindo as equações (3.7), (3.6) em (3.4), tem-se a equação (3.8)

$$-\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = 0 \quad (3.8)$$

As equações (3.3) e (3.8) são conhecidas como as equações de Stokes permanentes e são equações diferenciais parciais lineares para o caso de incompressibilidade em que  $\text{Re} \ll 1$ . O que nos leva a (3.9)

$$-\nabla P + \rho \mathbf{g} x + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = 0 \quad (3.9)$$

Em que  $x$  é dado em metros.

A escala de tempo requerida para se alterar o campo de velocidade de um estado permanente para outro é muito maior que a escala de tempo para uma mudança na configuração do contorno sólido, isto é, hipótese de um regime quasi-estacionário do *creeping flow* (escoamento em que  $\text{Re} \ll 1$ ).

## 3.2 Energia, linearidade, problemas de mobilidade e resistência

A dissipação de energia devido a viscosidade de um fluido é dada pela equação (3.10)

$$\int_V \phi_d dV = \int_V 2\mu e : \nabla \mathbf{U} dV = \int_V \boldsymbol{\sigma}_{ij} e_{ij} dV \quad (3.10)$$

Onde  $\phi_d$  é a taxa de energia dissipada por unidade de volume.

Aplicando para a equação de dissipação de energia para as partículas obtemos a igualdade expressa na equação (3.11)

$$\int_V \boldsymbol{\sigma}_{ij} e_{ij} dV = \int_s \mathbf{U}_i \boldsymbol{\sigma}_{ij} n_j dS \quad (3.11)$$

Onde

$$\int_s \mathbf{U}_i \boldsymbol{\sigma}_{ij} n_j = \int_s \mathbf{U}_i + (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{x})_i \boldsymbol{\sigma}_{ij} n_j dS = \mathbf{U}_i \mathbf{F}_i + \boldsymbol{\omega}_i \mathbf{T}_i \quad (3.12)$$

Devido a linearidade das equações de Stokes o movimento de vários corpos em regime de baixo número de Reynolds pode ser resolvido aplicando-se o princípio da superposição. Com isso os conceitos de resistência e mobilidade surgem. Problemas de mobilidade são considerados os problemas físicos de interação de forças e torques sobre uma partícula. Para um problema de mobilidade, a equação (3.13) fornece as velocidades de  $n$  partículas. Para um problema de resistência, a equação (3.15) fornece as forças hidrodinâmicas sobre as partículas.

$$\mathbf{U}^i = \mathbf{U}_o^i + \sum_{i \neq j} \mathbf{M}_{ij} \cdot \mathbf{F}^j(\mathbf{x}_j) \quad (3.13)$$

Onde  $\mathbf{M}_{ij}$  é a matriz mobilidade.

Em paralelo, tem-se que a dissipação de energia em problemas de mobilidade é expressa pela equação (3.14)

$$\int_V (\boldsymbol{\sigma}'_{ij} e'_{ij} - \boldsymbol{\sigma}_{ij} e_{ij}) dV = 2 \int_s \mathbf{U}_i (\boldsymbol{\sigma}'_{ij} - \boldsymbol{\sigma}_{ij}) n_j dS \quad (3.14)$$

Considerando que  $\boldsymbol{\sigma}'_{ij}$  e  $e'_{ij}$  são soluções das equações de Stokes e que satisfazem as mesmas condições de contorno. Para o caso de  $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$ . Onde  $n_j$  é o vetor normal a superfície. Para a resistência

$$\mathbf{F}^i = \mathbf{F}_o^i + \sum_{i \neq j} \mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{U}^j(\mathbf{x}_j) \quad (3.15)$$

Onde  $\mathbf{R}_{ij}$  é a matriz resistência. Sendo tais matrizes determinadas com base na solução fundamental de Stokes.

### 3.3 A solução fundamental da equação de Stokes

Considere o sistema de equações

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = -\mathbf{F} \sigma(\mathbf{x}) \quad (3.16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.17)$$

Em que aqui  $p$  é o termo de pressão modificada e  $P_{adm}$  a pressão adimensionalizada.

$$p = P_{adm} - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \quad (3.18)$$

A função delta de Dirac geralmente é utilizada para representar concentrações, picos de algum fenômeno físico. Tendo isso em mente, considerando a equação 3.16 podemos ver que  $\mathbf{F}$  é a força que um ponto de singularidade realiza sobre o fluido ao se transladar. O ponto de singularidade significa em poucas palavras a força concentrada em um ponto, no caso da partícula no fluido. Baseado nisso, tem-se que:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (3.19)$$

Para  $\mathbf{x} \neq 0$ .

$$\int_V \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV = -\mathbf{F} \quad (3.20)$$

e para  $\mathbf{x} = 0$ .

O volume  $V$  é o volume do escoamento no qual existem forças líquidas de superfície, causadas por exemplo pelo movimento de uma partícula que gera forças no fluido. Utilizando a transformada de Fourier, é possível obter a solução formal das equações de Stokes. A equação (3.21) e (3.22)

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{(3/2)} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \mathbf{U}(\mathbf{x}) dV(\mathbf{x}) \quad (3.21)$$

e

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{(3/2)} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{k}) dV(\mathbf{k}) \quad (3.22)$$

Onde  $\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{k})$  representa o campo de velocidade do escoamento no espaço do número de ondas  $\mathbf{k}$  e  $\mathbf{U}(\mathbf{x})$  o campo vetorial de velocidade no espaço físico tridimensional. O uso da transformada de Fourier é extremamente conveniente para encontrar a solução das equações de Stokes. A transformada de Fourier é uma ferramenta matemática que leva a equação de Stokes para um espaço recíproco. Basicamente a transformada pega uma equação diferencial parcial e transforma em uma equação algébrica, e então resolve-se a equação algébrica no espaço recíproco e depois trazemos de volta a solução para o espaço físico sendo a solução em função de  $\mathbf{k}$ .

Com isso, obtemos diferenciais no espaço físico  $\mathbf{x}$ , como o operador gradiente, podem ser associados a termos algébricos no espaço de onda  $\mathbf{k}$ . A solução fundamental da equação permanente de Stokes (3.23) consiste no par pressão e velocidade.

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}) = \mathbf{F} \cdot \frac{\mathbf{G}(\mathbf{X})}{8\pi\mu}, \quad p(\mathbf{X}) = \mathbf{F} \cdot \frac{P(\mathbf{X})}{8\pi\mu} \quad (3.23)$$

O tensor de Oseen-Burgers é dado pela equação (3.24)

$$\mathbf{G}_{ij}(\mathbf{X}) = \frac{1}{r} \delta_{ij} + \frac{1}{r^3} x_i x_j \quad (3.24)$$

O campo de pressão de Oseen-Burgers é dado pela equação (3.25)

$$P_j(\mathbf{X}) = 2\mu \frac{x_j}{r^3} + P_j^\infty \quad (3.25)$$

(1.5) A prova dessas equações consiste basicamente em dois passos. Primeiramente mostrou-se que para  $\mathbf{X} \neq 0$ , as soluções supracitadas satisfazem a equação de Stokes, e em seguida as condições para a equação de Stokes depender da função delta de Dirac. Diferenciando, notando que  $\frac{\partial r}{\partial X_k} = \frac{X_k}{r}$ , tem-se para  $\mathbf{X} \neq 0$

$$G_{ij,k} = -\frac{1\delta_{ij}x_k}{r^3} + \frac{1(\delta_{ik}x_j + \delta_{jk}x_i)}{r^3} - \frac{3x_i x_j x_k}{r^5} \quad (3.26)$$

e

$$\nabla^2 G_{ij} = G_{ij,kk} = \frac{2\delta_{ij}}{r^3} - \frac{6x_i x_j}{r^5} \quad (3.27)$$

Podemos notar também que a equação da continuidade é satisfeita em 3.11, bastando apenas substituir o índice  $k$  pelo índice  $i$  e considerar que  $\delta_{ij}x_i = x_j$ ,  $\delta_{ii} = 3$  e  $x_i x_i = r^2$ . A integral de  $G\mathbf{X} \cdot \mathbf{n}$  sobre

um pequena esfera de raio  $a$  sobre a origem é

$$\oint_S \left( \frac{\delta_{ij}}{a} + \frac{\eta_i \eta_j}{a} \right) \eta_j dS \quad (3.28)$$

que, levando em conta o quão pequeno é  $dS$ , tem-se como  $O(a)$  para  $a$  pequeno. Assim a origem não contém uma fonte ou "sink" e a continuidade é satisfeita em todo lugar. Para  $\mathbf{X} \neq 0$ , o termo Laplaciano pode ser escrito como

$$\nabla^2 G_{ij} = \frac{2\delta_{ij}}{r^3} - \frac{6x_i x_j}{r^5} = -2 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left( \frac{1}{r} \right) \quad (3.29)$$

e então o tensor Oseen tem um campo de pressão igual ao descrito na equação (3.25). Ficando assim demonstrado. Considerando agora o campo de tensões, descrita por  $\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\Sigma}$ , da função de Green. O campo de tensão do tensor de Oseen pode ser expresso por

$$8\pi\mu\Sigma_{ijk} = -P_j\sigma_{ik} + \mu(G_{ij,k} + G_{kj,i}) = -6\mu\frac{x_i x_j x_k}{r^5} \quad (3.30)$$

Considerando a integral de volume

$$\int_V \nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma} dV \quad (3.31)$$

Com  $V$  contendo  $\mathbf{O}$  (origem). Desde que  $\nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma} = 0$  todo lugar com exceção da origem, é integral sobre  $V$  pode ser substituída com uma integral para o volume de uma esfera de raio  $a$ , com  $a$  arbitrariamente pequeno. Utilizando o teorema da divergência tem-se que

$$F_i \oint_S \Sigma_{ijk} \eta_k dS(\mathbf{X}) = -\frac{3F_j}{4\pi} \oint \frac{\eta_i \eta_j \eta_k}{a^2} \eta_k dS = -F_i \quad (3.32)$$

Utilizando  $\mathbf{X} = a\boldsymbol{\eta}$  para a integral de  $\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\eta}$  em todas as direções,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \eta_i \eta_j \sin\theta d\theta d\phi = \frac{4\pi}{3} \delta_{ij} \quad (3.33)$$

Assim fica provado que  $\frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{X})}{8\pi\mu}$  é a função de Green para a equação de Stokes.

Substituindo o valor dos tensores e considerando que  $x\mathbf{o}$  é o ponto em que uma partícula gera um distúrbio no campo de velocidades, obtemos que a função de Green para o campo de pressão é dado pela equação (3.34)

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}, \mathbf{x}\mathbf{o}) = \frac{1}{8\pi} \frac{2(\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{o})}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{o}|^3} \quad (3.34)$$

Onde  $r$  é o módulo do vetor posição  $x$ .

Analogamente para a velocidade tem-se a equação (3.35)

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}\mathbf{o}) = \frac{I}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{o}|} + \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{o})(\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{o})}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{o}|^3} \quad (3.35)$$

A fim de calcular o tensor de tensões do fluido utilizando as as funções de distúrbio de singularidade e as funções de pressão fazemos então

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{x}\mathbf{o}) = \frac{\mathbf{F}}{8\pi} \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}\mathbf{o}) \quad (3.36)$$

Onde  $\mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$  é um tensor de terceira ordem expresso por

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{6(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^5} \quad (3.37)$$

Sendo assim, as equações anteriormente mencionadas (3.23) fornecem o campo de pressão, velocidade e tensão em um escoamento produzido por uma singularidade que translada no interior do fluido.

### 3.4 Formulação matemática para vários corpos submetidos a interações hidrodinâmicas

A solução fundamental para escoamentos em baixos números de Reynolds, dada pelas equações (3.24), (3.25) e (3.36), fornece o campo de pressão, velocidade e tensão de um escoamento produzido por um ponto de força, ou singularidade, que translada no interior do fluido.

Com o objetivo de verificar a existência de interações hidrodinâmicas e magnéticas, investigou-se a microdinâmica da suspensão, para o caso de dinâmica com muitos corpos. A fim de analisar o comportamento de partículas suspensas no fluido, será utilizada uma formação de mobilidade para o caso em que  $St \rightarrow 0$  as partículas seguindo as linhas de corrente de fluido de perto. Por serem lineares as equações de Stokes, temos que

$$\mathbf{U} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{F} \quad (3.38)$$

ou matricialmente

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{M}_{ij} \cdot \mathbf{F}_j, \quad \text{para } i = 1, \dots, N \text{ e } j = 1, \dots, N \quad (3.39)$$

Em que cada termo da matriz (3.39) é na verdade uma matriz  $3 \times 3$ . O traço de  $M$  representa a soma do efeito da força resultante em cada partícula  $a$  da suspensão acoplado a própria velocidade da partícula.

A variável  $\mathbf{U}$  representa as velocidades da partículas,  $\mathbf{M}$  é a matriz mobilidade e  $\mathbf{F}$  as forças que atuam nas partículas de suspensão.

A Lei de Faxén nos fornece a força exercida por uma esfera de raio  $a'$  sendo essa força determina por

$$\mathbf{F}_a = 6\pi \eta a' [\mathbf{U}_a - (1 + \frac{a'^2}{6} \nabla^2) \mathbf{u}'(\mathbf{x}_a)] \quad (3.40)$$

Em que  $\mathbf{U}_a$  é a velocidade da partícula  $a$  e  $\mathbf{u}'$  é o campo de velocidades em que a partícula está imersa. Aplicando o princípio da superposição para determinar o escoamento induzido em uma posição arbitrária do domínio fluido pelo movimento de cada partícula distinta, tem-se que

$$\mathbf{u}'(x) = \sum_{n=1}^N \frac{1}{8\pi\eta} (1 + \frac{a_n'^2}{6} \nabla^2) \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \cdot \mathbf{F}_n \quad (3.41)$$

Onde  $\mathbf{G}(\mathbf{r})$  é o distúrbio de singularidade dado pela equação (3.42)

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} (\mathbf{I} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2}) \quad (3.42)$$

Em que  $\mathbf{r} = x - x_n$ .

Sendo assim a força induzida em uma esfera de raio  $a'$  devido ao campo de velocidades induzido por outras  $n$  esferas que se deslocam na mesma suspensão é dado por

$$\mathbf{F} = 6 \pi \eta a' \mathbf{I} \cdot [\mathbf{U}_a - \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{n=1}^N (1 + \frac{a'^2}{6} \nabla^2) (1 + \frac{a_n'^2}{6} \nabla^2) \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_n] \quad (3.43)$$

Convinientemente o tensor mobilidade de pares  $\mathbf{G}^{an}$ , utilizando uma propriedade fundamental da microhidrodinâmica, dada por  $\nabla^2 \nabla^2 G = 0$  pode ser escrito pela equação

$$\mathbf{G}^{an} = \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \frac{1}{r} [I + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] + \frac{1}{3r^3} (a_a'^2 + a_n'^2) [I - 3\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] \right\} \quad (3.44)$$

A equação (3.44) se reduz a

$$\mathbf{G}^{an} = \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \frac{1}{r} [I + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] + \frac{2}{3r^3} a'^2 [I - 3\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] \right\} \quad (3.45)$$

No caso de uma suspensão monodispersa (suspensão que o código SIMS trabalha). O tensor  $\mathbf{G}^{an}$  descrito na equação (3.45) é denominado tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969). Este depende apenas da configuração do sistema particulado em dado instante de tempo e possui um decaimento lento, pois varia com  $\frac{1}{r}$ . Seja  $\mathbf{M}^s$  e  $\mathbf{M}^p$  tensores de automobilidade e de mobilidade entre pares respectivamente, dados por

$$\mathbf{M}_{aa,ij}^s = \frac{\sigma_{ij}}{6\pi\eta a'}, \quad a = 1, \dots, N \quad (3.46)$$

e

$$\mathbf{M}_{an,ij}^p = \mathbf{G}_{ij}^{an}, \quad a, \quad n = 1, \dots, N, \quad a \neq n \quad (3.47)$$

isolando o termo que representa a velocidade da partícula  $a$  na expressão (3.40) podemos escrever

$$\mathbf{U}_a = \mathbf{M}^s \cdot \mathbf{F}_a + \sum_{a \neq n} \mathbf{M}^p \cdot \mathbf{F}_n \quad (3.48)$$

Onde a soma  $\mathbf{M}^s + \mathbf{M}^p$  é chamada de matriz mobilidade global  $M$ . Assim obtemos a equação (3.38). Para o problema da sedimentação de uma suspensão sujeita apenas a interações hidrodinâmicas, a força atuante em cada partícula é a soma da força gravitacional com um força repulsiva de curto alcance. Além disso podemos adicionar a força de contato repulsiva baseada no modelo de Hertz, descrita no modelo anterior, para evitar a superposição de partículas de modo que

$$\mathbf{F}_n = -\frac{4}{3} \pi (a')^3 \Delta \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_r + \mathbf{f}_c \quad (3.49)$$

Para o caso da presença de forças magnéticas, basta adicionar um termo  $\mathbf{F}_m$  que representa as forças de interação magnética partícula-partícula e partícula-campo externo.

### 3.4.1 Interações hidrodinâmicas periódicas

Com relação a periodicidade das interações, mencionado anteriormente neste relatório, o código SIMS torna a simulação realizada mais interessante no sentido de tornar a simulação o mais real possível dos resultados experimentais. A periodicidade é uma solução para o problema de convergência de propriedades estatísticas obtidas em simulações de muitos corpos (ordem de  $10^{23}$  partículas) que

envolvem interações com decaimentos lentos da ordem de  $1/r'$  Em que  $r'$  é a distância entre duas partículas referênciais. Esse problema é gerado devido o valor significativo dos efeitos de parede para sistemas com poucas partículas que dominam o comportamento efetivo do sistema. Matematicamente falando, a condição de contorno de periodicidade é implementada por meio de um operador tensorial  $P(1,1,2,1,3)$  aplicado ao vetor posição  $X_a$ . 11, 12, 13, representam os comprimentos de cada aresta da célula central.  $P$  é definido como

$$P_{ij} = (1 + \phi_i)\delta_{ij} \tag{3.50}$$

onde

$$\phi_i = \begin{cases} -l_i & \text{se } x_i > l_i \\ 0 & \text{se } 0 < x_i < l_i, \quad i = 1, 2, 3 \\ l_i & \text{se } x_i < 0 \end{cases}$$

Para o cálculo das velocidades em cada partícula  $a$  na célula central deve levar em consideração as interações que esta possui com cada partícula  $b$  da mesma célula central, além de todas as outras partículas imagens nas células imagens.

A figura 3.1 ilustra o decaimento das interações entre corpos e também auxiliam o entendimento sobre periodicidade no agregado.

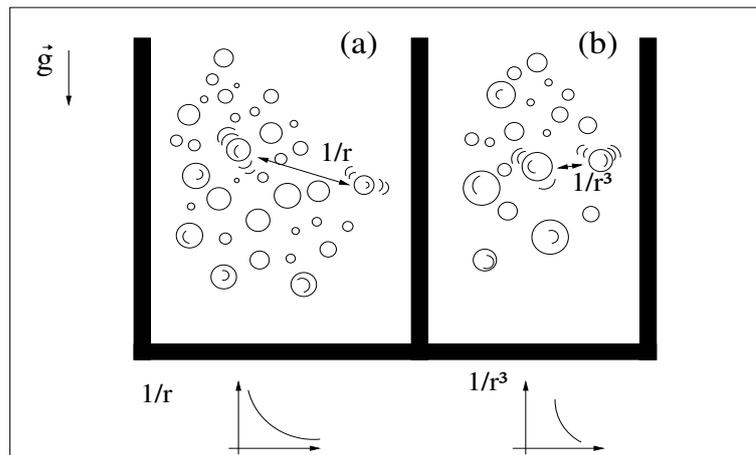


Figura 3.1: A figura ilustra uma configuração de interação periódica (a), muitos corpos envolvendo decaimentos lentos. E uma configuração de interação não periódica (b), decaimentos mais rápidos. O gráfico na figura mostra o decaimento mais suave de  $1/r$  em contraste com o decaimento mais acelerado de  $1/r^3$ . Em que  $r$  é a distância entre os corpos selecionados.

### 3.4.2 Células imagens

As células são ferramentas criadas para simular o efeito de uma suspensão finita, sendo que esta irá contribuir na convergência da estatística de suspensão com determinado número de partículas. Para o código SIMS, basicamente são os boxes que contém as partículas de suspensão sendo essas denominadas *lattices* que contém as partículas da suspensão. Interações com decaimento de longo alcance em sistemas particulados exige a descrição de condições de contorno periódicas a fim de se evitarem os efeitos de finitude do sistema que introduzem falsas flutuações sem sentido físico nas médias de propriedades estatísticas da suspensão através da dominância dos efeitos de parede no comportamento dinâmico da suspensão.

### 3.4.3 Mobilidades hidrodinâmicas de Beenaker

Nesse relatório, será introduzido o conceito das mobilidades hidrodinâmicas de Beenaker. As mobilidades de Beenaker consiste no emprego das somas de Ewald (1921) utilizando o tenso de Rotner-Prager (1969). A fim de ilustrar o método considere um simples soma do tensor  $\mathbf{G}^{\text{an}}$  sobre um reticulado periódico  $\Xi$

$$\mathbf{G}^{\text{an}}(r') = \sum_{\mathbf{x} \in \Xi} \mathbf{G}^{\text{an}}(r' + \mathbf{x}) \quad (3.51)$$

Em que  $r'$  refere-se ao interior do boxe central discutido na subseção anterior. O objetivo é aplicar um tratamento específico para acelerar a convergência da equação (3.51). A técnica de Beenaker consistiu em utilizar um representação alternativa do tensor de Rotner-Prager (1969) para uma suspensão monodispersa, que será discutido em outra seção deste relatório.

Sendo assim encerra-se essa seção para a formulação matemática para vários corpos submetidos a interações hidrodinâmicas.

## CAPITULO 4

# FLUTUAÇÕES DE VELOCIDADE EM SISTEMAS PARTÍCULADOS

### 4.1 Movimento Browniano

O movimento randômico de micropartículas (com ordem de grandeza de  $1nm$  a  $10\mu m$ ) suspensas em um fluido foi explorado primeiramente por Brown em 1827 e atualmente tal fenômeno é chamado de movimento Browniano. O movimento Browniano de uma partícula em um fluido ocorre sob a ação de duas forças: uma força randômica causada pela colisão das partículas e uma força sistemática causada pelo atrito viscoso. A figura 4.1 ilustra o movimento Browniano.

Embora o estudo do agregado em questão não se refira ao movimento Browniano, essa seção foi inserida com o objetivo de apenas informar ao leitor sobre o estudo do *random walk* de micropartículas.

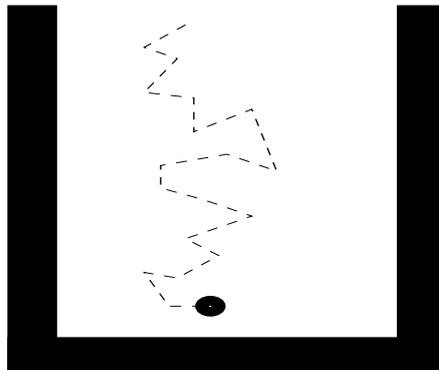


Figura 4.1: Ilustração de um movimento Browniano.

Para uma suspensão com muitas partículas este caminho randômico é caracterizado pela difusão de concentração de partículas  $c(\mathbf{x}, t)$  obedecendo uma equação de advecção-difusão expressão em (4.1).

$$\frac{Dc}{Dt} c = D \nabla^2 c \quad (4.1)$$

Onde  $c(\mathbf{x}, t)$  é a concentração de partículas,  $D$  a difusividade da trajetória randômica e  $\mathbf{U}$  denominado a média do momento sendo da sedimentação ou do escoamento do fluido.

Considerado que o agregado tenha raio de giração  $R_A$ , definimos o coeficiente de difusão para o agregado como sendo  $D_A$  de modo análogo ao coeficiente de Stokes-Einstein associado à intensidade de

flutuações Brownianas, dado por  $D_A = k_A T / 6 \pi \mu R_A$ , ou seja, como  $R_A \gg A_p$ , em que  $A_p$  denota o raio de uma partícula isolada, temos que  $D_A \ll D$ , em que  $D$  é coeficiente para uma partícula isolada definido anteriormente. Deste modo temos que  $Pe_A \gg Pe$ .

Considerando o balanceamento da força de arrasto de Stokes com a força potencial, temos uma velocidade estável das partículas dada por  $-\nabla V_{potencial} / 6 \pi \mu A_p$ . E então podemos definir o fluxo de partículas como  $\mathbf{q} = -c \nabla V_{potencial} / 6 \pi \mu A_p$ . No equilíbrio termodinâmico a distribuição de Maxwell-Boltzmann fornece a concetração de partículas

$$c(\mathbf{x}) = c_0 e^{-\frac{V_{potencial}(\mathbf{x})}{kT}} \quad (4.2)$$

Onde  $k$  é a constante de Boltzmann e  $V_{potencial}$  é a força potencial. Realizando um balanceamento entre o fluxo difusivo e o fluxo de partículas obtemos

$$D \nabla c = -\frac{c_0 e^{-V_{potencial}/kT} \nabla V_{potencial}}{6 \pi \mu A_p} = \frac{kT}{6 \pi \mu A_p} \nabla c \quad (4.3)$$

Simplificando o termo  $\nabla c$  da equação (4.3) obtem-se

$$D = \frac{kT}{6 \pi \mu A_p} \quad (4.4)$$

#### 4.1.1 Equação de Langevin

A equação de Langevin é o equilíbrio da segunda lei de Newton para a partícula em suspensão com a força do fluido dividido em uma parte com atrito constante ( $-6 \pi \mu A_p \mathbf{v}$ ) com uma parte randômica  $f(t)$ . O movimento de uma esfera flutuante de raio  $A_p$ , em um fluido com viscosidade  $\mu$  e massa específica  $\rho$  está sujeito ao movimento Browniano, tão quanto as forças inerciais e viscosas governada pelo balanço.

$$m \dot{\mathbf{v}} + 6 \pi \mu A_p \mathbf{v} = f(t) \quad (4.5)$$

A fim de caracterizar  $f(t)$ , leva-se em conta a relevância de dois pressupostos. Primeiramente, as forças Brownianas são dadas em direções e magnitudes randômicas e independentes da escala de tempo do movimento das partículas. Dessa forma, matematicamente, podemos escrever  $f(t)$  como

$$\langle \mathbf{f}(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{f}^i(t) \quad (4.6)$$

A parte randômica é governada pela inercia térmica e com velocidade dada pelo balanço de energia

$$\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = \frac{1}{2} kT \quad (4.7)$$

#### 4.1.2 Tipos de movimento Browniano

O movimento translacional da partícula mantém as partículas coloidais sedimentando fora da suspensão, mas o transporte da partícula é normalmente tão lento que chega a ser da ordem de  $10^6 s$  para um distância de  $1mm$  no caso do coeficiente difusivo da ordem de  $10^{-12} m^2/s$ . Existe também um técnica complicada em suspensões não diluídas onde o efeito do refluxo faz diferença entre um

baixo gradiente de concentração difusivo usada em um fluxo Fickiano e o traçador difusividade de uma única partícula marcada que “caminha” aleatoriamente. O movimento Browniano na posição relativa das partículas e na suspensão também é veloz, considerando o tempo para a difusão das partículas e a separação típica interparticular.

## 4.2 Sedimentação de partículas monodispersas

Como discorrido anteriormente, as partículas tratadas no código SIMS são monodispersas e grandes o suficiente para que não possamos observar um comportamento Browniano das partículas. Desta maneira o comportamento do agregado é estudado por equações que fornecem a velocidade de sedimentação de cada partícula bem como a concentração e intensidade de interação entre o agregado formado.

A velocidade de sedimentação de uma esfera dado pela equação (1.5) usualmente é escrita da forma

$$\mathbf{U}_o = \frac{2 a^2 (\rho_p - \rho_e)}{9 \mu_e} \mathbf{g} \quad (4.8)$$

Em que  $\rho_p - \rho_e$  é a diferença de massa específica entre a partícula e o fluido,  $a$  é o raio da partícula,  $\mu_e$  viscosidade do fluido,  $\mathbf{g}$  a aceleração da gravidade e  $\mathbf{U}_o$  a velocidade de sedimentação.

As interações hidrodinâmicas entre os corpos causa a velocidade de sedimentação  $\mathbf{U}$  dos mesmos e é diferente da velocidade  $\mathbf{U}_o$ . Seja a fração volumétrica  $\phi$  muito menor que 1. Utilizando tal hipótese significa considerar que interação entre os pares será suficientemente precisa. Assume-se então que  $\langle U - U_o \rangle$  é uma função arbitrária que seu valor médio é diferente de zero e depende da fração volumétrica  $\phi$ . E então o problema se resume em encontrar o valor médio de  $\langle \mathbf{U} \rangle$ .

Adontando um volume  $V$  que contenha muitas partículas ( $N \gg 1$ ), tem-se  $N$  partículas e  $\Theta_N$  uma configuração para cada partícula. Sendo  $\mathbf{X}$  um ponto dentro do volume  $V$ , introduzimos a distribuição de probabilidade de configuração  $P(\Theta_N)$  dada pela equação (4.9).

$$P(\Theta_N) d\Theta_N = P(\mathbf{X} + \mathbf{r}_1, \mathbf{X} + \mathbf{r}_2), \dots, \mathbf{X} + \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \quad (4.9)$$

A equação (4.9) fornece a probabilidade de encontrar o centro de  $N$  partículas em um elemento de volume  $d\mathbf{r}_N$  ao redor dos pontos  $\mathbf{X} + \mathbf{r}_N$ . A distribuição é não normalizada e obedece a condição

$$\int P(\Theta_N) d\Theta_N = N!. \quad (4.10)$$

Para a condição normalizada

$$\int P(\Theta_1) d\Theta_1 = N. \quad (4.11)$$

Em que  $P(\Theta_1) = P(\mathbf{X} + \mathbf{r})$  e  $P(\mathbf{X} + \mathbf{r}) = N/V = n$  sendo que  $n$  é o número de partículas em uma unidade de volume.

Em adicional, para a probabilidade incondicional  $P(\Theta_N)$ , introduziremos a probabilidade condicional  $P(\Theta_N | \mathbf{X})$  tal que  $P(\Theta_N | \mathbf{X}) d\Theta_N$  é a chance de encontrar  $N$  partículas em uma região denominada  $d\Theta_N$  dado que o centro de  $(N+1)$ -ésima partícula é dado por  $\mathbf{X}$ . Dessa forma introduzimos o conceito de partícula teste. Escrevendo a relação entre a probabilidade condicional com a incondicional:

$$P(\Theta_N) = P(\mathbf{X} + \mathbf{r}_k | \mathbf{X}) P(\Theta_{N-1} | \mathbf{X}, \mathbf{X} + \mathbf{r}_k). \quad (4.12)$$

As interações hidrodinâmicas diminuem rapidamente com o aumento da distância entre as partículas.

Tendo introduzido a distribuição de probabilidade não condicional e a condição, apresentamos dois tipos de média. Para a probabilidade não condicional temos

$$\langle G \rangle = \frac{1}{N!} \int G(\mathbf{X}, \Theta_N) P(\Theta_N) d(\Theta_N) \quad (4.13)$$

A (4.15) fornece o valor da função arbitrária  $G(\mathbf{X}, \Theta_N)$  no ponto  $X$ , em média para todas as configurações  $\Theta_N$

e para a probabilidade condicional temos

$$\langle H \rangle = \frac{1}{N!} \int H(\mathbf{X}, \Theta_N) P(\Theta_N | \mathbf{X}) d(\Theta_N). \quad (4.14)$$

A (4.16) fornece o valor da função arbitrária  $H(\mathbf{X}, \Theta_N)$  no ponto  $X$ , dado que  $\mathbf{X}$  é o centro de  $(N + 1)$ -ésima partícula.

Por consequência, se obtemos um valor randômico da velocidade de sedimentação de uma partícula teste como a  $H$  da equação (4.16), ela irá nos fornecer a média da velocidade de sedimentação dessas partículas quando existir uma partícula na fronteira, que é possivelmente apenas uma homogênea, uma suspensão pouco concentrada.

Utilizando a equação (4.13) podemos reescrever  $\langle G \rangle$  como

$$\langle G \rangle = \int G(\mathbf{X}, \mathbf{X} + \mathbf{r}) P(\mathbf{X} + \mathbf{r}) d\mathbf{r} + o \quad (4.15)$$

E então  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X} + \mathbf{r})$  é o valor da função  $G$  no ponto  $\mathbf{X}$  abaixo da condição que  $\mathbf{X} + \mathbf{r}$  é o centro da partícula.

A principal dificuldade associada com a evolução da integral (4.15) é a convergência. Sabemos que a velocidade do fluido no ponto  $\mathbf{X}$  induzido pelo momento da partícula centrada em  $\mathbf{X} + \mathbf{r}$  muda com o  $r^{-1}$  quando  $r/a \gg 1$ . Portanto, a integral soma as contribuições das perturbações de movimentos de todas as partículas divergentes.

$\mathbf{X}_o$  é o centro da partícula teste que é cercada por  $n$  partículas levando em consideração a existência da configuração  $\Theta_N$ . A média da velocidade de sedimentação da partícula teste é dada pelo conjunto descrito em (4.16)

$$\langle U \rangle = \frac{1}{N!} \int \mathbf{U}(\mathbf{X}_o, \Theta_N) P(\Theta_N | \mathbf{X}_o) d\Theta_N \quad (4.16)$$

Também podemos reescrever a média da velocidade com a soma de três termos:

$$\langle \mathbf{U}(\mathbf{X}_o, \Theta_N) \rangle = \mathbf{U}_o + \langle \mathbf{V}(\mathbf{X}_o, \Theta_N) \rangle + \langle \mathbf{W}(\mathbf{X}_o, \Theta_N) \rangle \quad (4.17)$$

Em que a primeira parte  $\mathbf{U}_o$  é a velocidade de uma partícula isolada dada pela equação da

velocidade de Stokes, a segunda parte se refere a perturbação da velocidade da partícula teste induzida por influências de partículas vizinhas. Essa parcela está relacionada a Lei de Fåxen discutida no capítulo 3 deste relatório. Por fim temos a terceira parcela  $\langle \mathbf{W}(\mathbf{X}, \Theta) \rangle$  que ajuda a explicar o tamanho finito de partícula de teste, certificando-se que a condição nula de velocidade relativa se mantém na superfície da partícula. Podemos escrever também que

$$\langle \mathbf{U} \rangle = \langle \mathbf{U}_o \rangle + \langle \mathbf{V}_1 \rangle + \langle \mathbf{V}_2 \rangle + \langle \mathbf{W} \rangle \quad (4.18)$$

Em que

$$\langle \mathbf{V}_1 \rangle = \frac{1}{N!} \int \mathbf{u}(\mathbf{X}_o, \Theta_N) P(\Theta_N | \mathbf{X}_o) d\Theta_N, \quad (4.19)$$

$$\langle \mathbf{V}_2 \rangle = \frac{1}{N!} \int \frac{1}{6} a^2 (\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{X}, \Theta_N))_{X=X_o} u(\mathbf{X}_o, \Theta_N) P(\Theta_N | \mathbf{X}_o) d\Theta_N, \quad (4.20)$$

$$\langle \mathbf{W} \rangle = \frac{1}{N!} \int \mathbf{W}(\mathbf{X}_o, \Theta_N) P(\Theta_N | \mathbf{X}_o) d\Theta_N, \quad (4.21)$$

Em que  $\mathbf{W}(\mathbf{X}_o, \mathbf{X}_o + \mathbf{r}) = \mathbf{X}_o, \mathbf{X}_o + \mathbf{r} - \mathbf{U}_o - \mathbf{u}(\mathbf{X}_o, \mathbf{X}_o + \mathbf{r}) - \frac{a^2}{6} (\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{X}, \mathbf{X}_o + \mathbf{r}))_{X=X_o} \cdot \mathbf{U}(\mathbf{X}_o, \mathbf{X}_o + \mathbf{r})$  é a velocidade de sedimentação da partícula centrada em  $\mathbf{X}_o$ , e  $\mathbf{u}(\mathbf{X}_o, \mathbf{X}_o + \mathbf{r})$  é a velocidade de sedimentação do fluido no ponto  $\mathbf{X}$  quando a partícula está presente no ponto  $\mathbf{X}_o + \mathbf{r}$ .

### 4.3 Partículas que pertencem ao agregado e escape de partículas - Descrição do algoritmo

Parte da proposta deste relatório consiste em apresentar o algoritmo que será utilizado para a contagem de partículas que escapam do agregado. Sendo essa uma das propostas de otimização do código SIMS, Gontijo (2013).

A figura 4.2 auxilia o leitor a compreender o funcionamento da subrotina que será criada. Uma das ideias propostas consiste basicamente em definir um raio médio para o agregado através da posição de uma partícula que durante a sedimentação sempre, ou quase sempre, se encontrará no centro do agregado. A partir do raio médio do agregado, definir a distância de todas as partículas do centro do agregado e então verificar por método binário e com auxílio de uma variável contadora se a partícula pertence ou não ao agregado. E então o ciclo (de geração do raio médio) se reinicia até que determinado intervalo de tempo seja concluído.

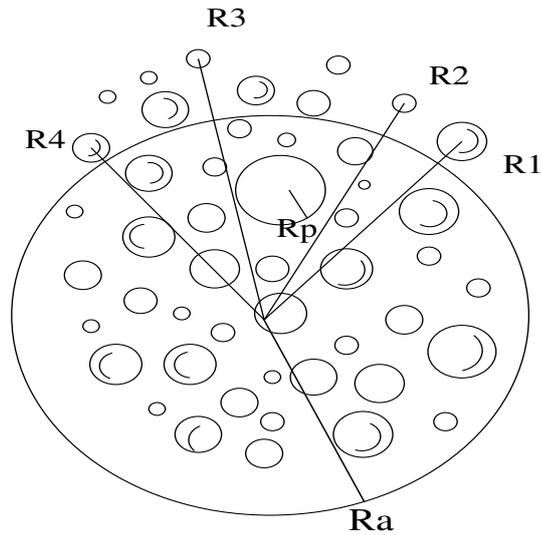


Figura 4.2: Distâncias das partículas para o centro do agregado.

Em que  $Ra$  é o raio médio do agregado,  $Ri$  é a distância do centro da partícula  $i$  para o centro do agregado  $Rp$  é o raio da partícula. É importante lembrar que as partículas possuem o mesmo raio, pois o código trata de uma suspensão monodispersa.

Seja  $T$  a subtração expressa em (4.22)

$$T = Ri - Rp - Ra \quad (4.22)$$

Caso  $T$  seja positivo, significa que a partícula está fora do raio do agregado definido e então a variável binária atribuirá valor 1 para a condição de  $T > 0$  de forma que será contabilizada em uma variável contadora essa partícula fora do agregado. Caso  $T$  seja negativo, a partícula analisada pertence ao agregado e não é contabilizada na variável contadora, pois a variável binária atribuirá valor 0 para tal condição ( $T < 0$ ) fazendo com que a partícula não seja contada.

## 4.4 Velocidade das partículas

A análise da média e flutuações de velocidades do agregado é fundamental para a caracterização da dinâmica do mesmo. Para as seguintes subseções, a variável estatística adotada para a realização de testes de convergência é a velocidade média de suspensão do agregado, tendo como foco principal mostrar o problema de divergência do uso das mobilidades de Rotner-Prager (1969) causado pela presença de poucas partículas. Beenakker (1986) foi o primeiro pesquisador a utilizar a técnica das somas de Ewald (1921) para problemas de interações hidrodinâmicas que utiliza o tensor de Rotner-Prager (1969). A metodologia da técnica aplicada por Beenakker se inicia com a seguinte representação alternativa do tensor descrito na equação (3.45), retomando ao texto descrito na subseção "Mobilidades hidrodinâmica de Beenaker".

$$\mathbf{G}^{an}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu} \left[ 1 + \frac{2}{3} a'^2 \nabla^2 \right] (\nabla^2 \mathbf{I} - \nabla \nabla) r \quad (4.23)$$

Em que a (4.23) é válida para suspensões monodispersas, onde o raio de todas as partículas são iguais, para suspensões polidispersas o termo  $\frac{2a'^2}{3}$  seria representado por  $(a'_a{}^2 + a'_n{}^2)/3$ .

#### 4.4.1 Velocidade média da suspensão em sistemas não-periódicos

A fim de caracterizar o agregado a necessidade de verificar a convergência de uma variável estatística tornou-se necessária. Através de métodos experimentais, Gontijo (2013), mostrou que para sistemas não-periódicos a velocidade média da suspensão é divergente.

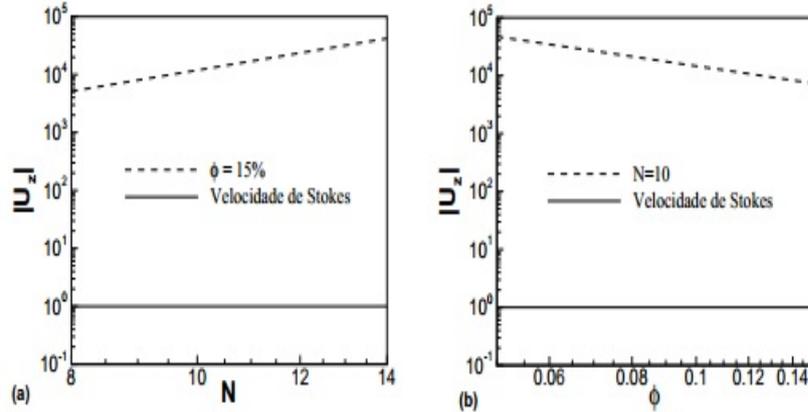


Figura 4.3: Variação da velocidade média da suspensão em função de um número de partículas (a) e da fração volumétrica das partículas (b) para um sistema não periódico com interações hidrodinâmicas simples utilizando o tensor mobilidade de Rotne-Prager. Figura retirada da tese "Micromecânica e Microhidrodinâmica De Suspensões Magnéticas"(2013).

Podemos observar uma grande diferença entre a ordem de magnitude dos valores da velocidade média em função de valores esperados, considerando que a ordem de grandeza deveria ser a mesma da velocidade de Stokes. O movimento descendente das partículas causam um deslocamento de um pequeno volume de fluido para baixo e então essa massa que chega ao fundo do recipiente retorna em sentido ascendente empurrando as partículas para cima, esse fenômeno é conhecido como o efeito *backflow*, sendo esse o responsável pela diminuição da velocidade média das partículas. Mesmo com o aumento da fração volumétrica de partículas, os valores médios da velocidade de sedimentação continuam fora da ordem da magnitude esperada. Comprovando assim a divergência das interações não periódicas utilizando o tensor de mobilidade de Rotne-Prager (1969).

#### 4.4.2 Velocidade média em sistemas periódicos

Ao contrário do que foi descrito para a análise da velocidade média da suspensão em sistemas não-periódicos, para a análise com condições de contorno periódicas, podemos observar que a velocidade média da suspensão converge para uma faixa de valores da mesma ordem de grandeza das correlações de Richardson-Zaki (1954) e Brady-Durlofsky(1988).

Para o próximo relatório será discorrido melhor a influência que o número de realizações bem como o número de lattices pode afetar na velocidade média de sedimentação do sistema.

### 4.5 Posição do centro de massa do agregado

A posição do centro de massa juntamente com a distribuição das partículas ao longo dos boxes será discutida nessa seção do relatório.

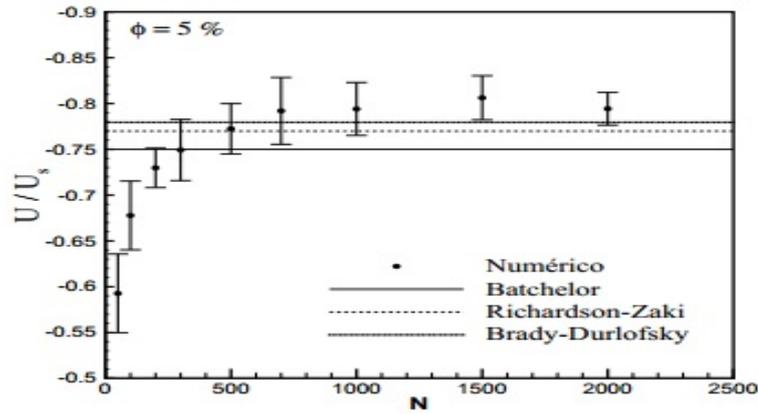


Figura 4.4: Variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas para uma fração volumétrica  $\phi = 0.05$ . Os valores numéricos são comparados com a teoria assintótica de Batchelor (1972) e com as correlações empíricas de Richardson-Zaki (1954) e Brady-Durlofsky (1988). Tese "Micromecânica e Microhidrodinâmica De Suspensões Magnéticas" (2013).

O código SIMS trabalha com o vetor posição de cada partícula e considera uma força de repulsiva que evita a superposição de partículas. As partículas em conjunto formam o agregado e através de diversas subrotinas do código SIMS, que computam forças, interações de campo e outros fatores que influenciam de alguma forma a sedimentação e formação do agregado, tem-se a posição de cada partícula da suspensão monodispersa que é impressa paralelo ao funcionamento do código.

A fim de definir o centro de massa do agregado, por se tratar de uma esfera, utilizamos as equações (4.24), (4.25) e (4.26)

$$x_c = \frac{\sum_{j=1}^n m_j x_j}{\sum_j m_j} \quad (4.24)$$

$$y_c = \frac{\sum_{j=1}^n m_j y_j}{\sum_j m_j} \quad (4.25)$$

$$z_c = \frac{\sum_{j=1}^n m_j z_j}{\sum_j m_j} \quad (4.26)$$

Com isso, temos um centro de massa bem definido para o agregado.

As figuras 4.5, 4.6 e 4.7 foram obtidas através de uma simulação executada no código SIMS e ilustram a variação do centro de massa ao longo do tempo de Stokes denominado  $t_s$ .

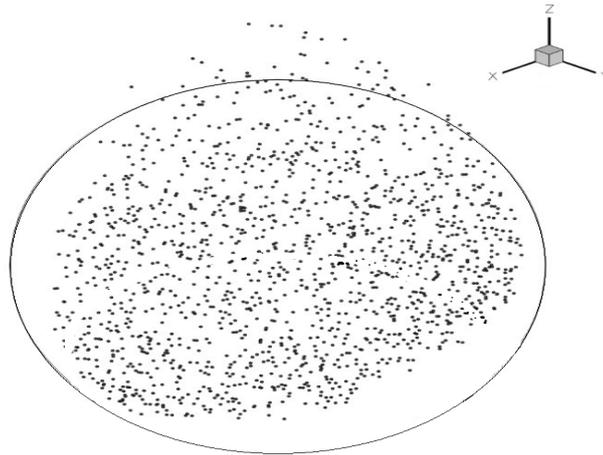


Figura 4.5: Imagem capturada do agregado no instante inicial. Primeira zona,  $t_s = 1[s]$  para uma fração volumétrica  $\phi$  de 0,128.

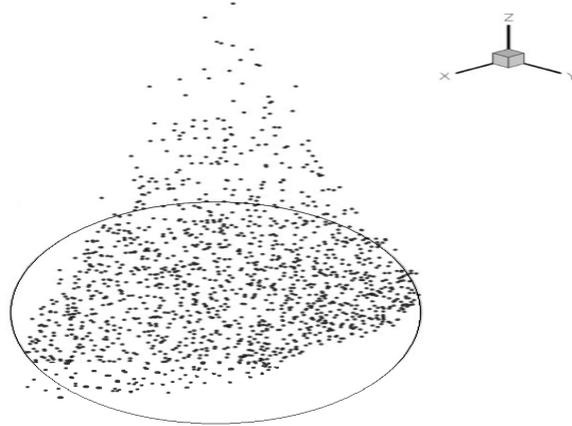


Figura 4.6: Imagem capturada do agregado após o instante inicial. Segunda zona,  $t_s = 2[s]$  para uma fração volumétrica  $\phi$  de 0,128.



Figura 4.7: Imagem capturada do agregado após o instante inicial. Terceira zona,  $t_s = 3[s]$  para uma fração volumétrica  $\phi$  de 0,128.

A medida que o agregado sedimenta, sua configuração inicial sofre alterações tanto na velocidade

de sedimentação como na distribuição das partículas ao longo do agregado. Com isso podemos observar uma mudança na razão de anisotropia do agregado, Taylor e Acrivos (1964), que será discutida na seção seguinte.

## 4.6 Razão de anisotropia do agregado

A razão de anisotropia do agregado é um importante parâmetro a ser aferido sendo uma propriedade de grande importância para caracterização do agregado. Essa razão será explorada melhor na seção dos resultados preliminares. A figura 4.8 apresenta fisicamente o significado da razão de anisotropia do agregado.

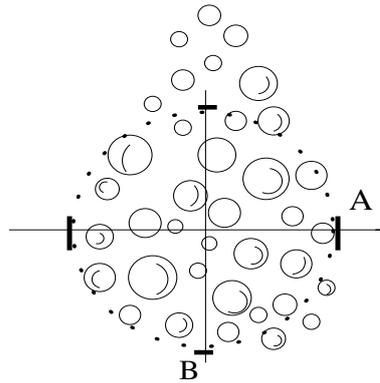


Figura 4.8: Raios considerados para o cálculo da razão de anisotropia.

Segundo Taylor e Acrivos (1964), A razão de anisotropia é dado por

$$D_{anis} = \frac{A - B}{A + B} \quad (4.27)$$

Em que  $A$  é o raio horizontal e  $B$  é o raio vertical do agregado. Conforme a razão de anisotropia diminui, ou seja,  $(A + B) > (A - B)$ , a tendência é que a frequência de desprendimento das partículas do agregado siga uma lei senoidal que embora seja interessante, não será discutida nesse relatório.

Para uma fração volumétrica  $\phi = 0,159$ , a razão de anisotropia calculada para o agregado da figura 4.9 é de  $D_{anis} = -0,125$ .

## 4.7 Dimensão fractal do agregado

A seção a seguir dedica-se basicamente em descrever a fração volumétrica do agregado.

A dimensão fractal do agregado se relaciona com a fração volumétrica do mesmo. A (1.8) denota o número de partículas do agregado e ainda pode ser escrita em função da dimensão fractal do agregado. Tem-se que a fração volumétrica é dada por

$$\phi = \frac{V_{particula}}{V_{total}} \quad (4.28)$$

Em que  $V_{particula}$  é o volume da partícula e  $V_{total}$  é o volume total de uma determinada região ocupado

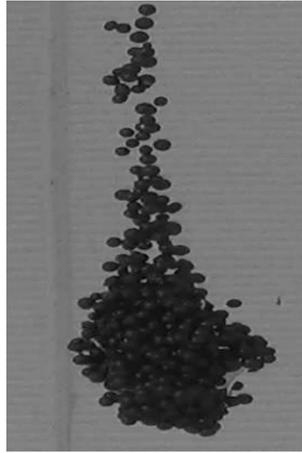


Figura 4.9: Razão de anisotropia  $D_{ans} = -0,125$  para uma fração volumétrica de 0,159. Imagem obtida no experimento realizado no laboratório de mecânica dos fluidos da Universidade de Brasília - UnB

pelo agregado. Logo a equação (1.8) pode ser escrita em função da (4.28) e então obtemos que

$$N_p = \frac{3 V_{total}}{4 \pi A_p} = K_f \left( \frac{R_g}{A_p} \right)^{D_f} \quad (4.29)$$

Em que  $D_f$  é a dimensão fractal do agregado. Para o código SIMS, as partículas esféricas apresentam o mesmo volume (suspensão monodispersa). O raio de rotação ou de rotação,  $R_g$ , é a distância uniforme de um eixo de referência na qual se supõe que toda a área esteja distribuída. O raio de giração representa a distância do eixo ou ponto correspondente na qual se pode concentrar toda a área da superfície estudada de modo que se tenha o mesmo momento de inércia.  $A_p$  é o raio da partícula e  $K_f$  é um fator pré-exponencial.

Para uma suspensão com  $\phi = 0,128$  com 1000 partículas, a figura 4.10 ilustra a configuração do agregado utilizando o código SIMS.

## 4.8 Formação do agregado

A formação do agregado será discutida nessa seção, e também aqui serão exploradas as propriedades que influenciam em sua formação.

É possível tornar a condição inicial de formação do agregado como uma configuração quase perfeitamente esférica, isso depende de como as partículas são depositadas no fluido. Inicialmente as partículas se mantem presa ao agregado, entretanto, conforme as partículas sedimentam e sofrem interações entre si através do fluido, a configuração do agregado muda e é possível observar a formação de uma esteira que "aprisiona" algumas partículas que antes estavam presas ao agregado.

Mesmo que todas as partículas de uma suspensão sejam esferas idênticas de mesmo tamanho e massa específica, elas não sedimentarão em uma mesma velocidade. A variação da velocidade de sedimentação decorre de interações entre o fluido e as esferas que sedimentam além de imperfeições que as esferas possuem. Dessa forma, o agregado ao sedimentar possivelmente apresentará distorções em sua configuração. A formação de microagregados formados por dímeros e trímeros podem ser observados. Observando a figura 4.11, podemos verificar a formação da esteira com algumas partículas

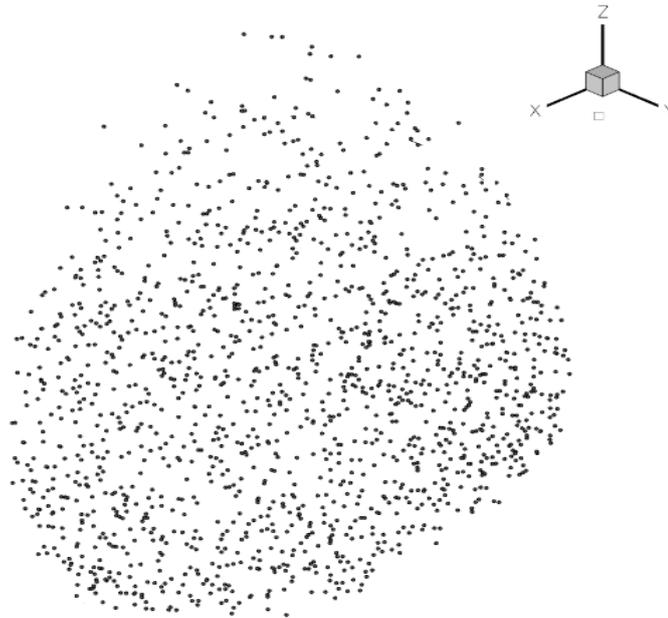


Figura 4.10: A figura ilustra a configuração do agregado para uma fração volumétrica igual à  $\phi = 0,128$ , com aproximadamente 1000 partículas. A dimensão fractal do agregado em questão pode ser obtida através da equação (4.29).

que pertenciam ao agregado. A figura 4.12 mostra a formação de pequenos grupos de agregados durante uma sedimentação.

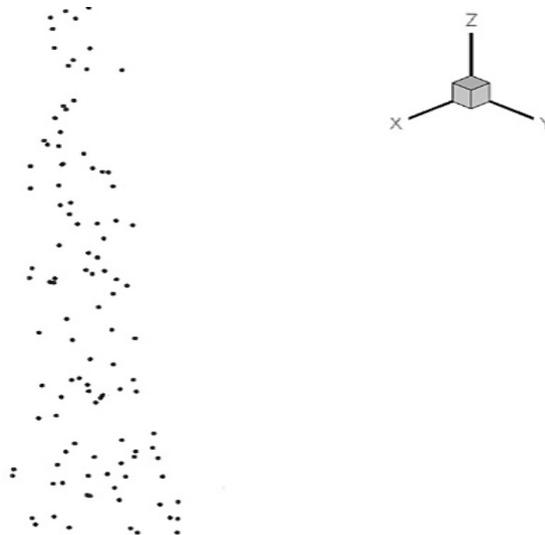


Figura 4.11: Formação da esteira para uma fração volumétrica  $\phi$  de 0,128. Não foi possível capturar o centro de massa do agregado devido a limitações das máquinas disponíveis. Podemos observar a formação de alguns dímeros e trímeros na região central da figura.



Figura 4.12: Formação de microagregados para uma fração volumétrica  $\phi$  de 0,128. Podemos observar a presença de dímeros, trímeros e outras formas de junção das partículas durante a sedimentação.

## 4.9 Descrição da função distribuição de probabilidade do número de partículas por agregado

Esta seção está destinada a realização de uma revisão bibliográfica sobre o movimento Browniano e como as distribuições estatísticas se relacionam com o movimento no sentido de tentar descreve-lo.

O deslocamento sucessivo de uma partícula por influência externa  $r_1, r_2, r_3, \dots, r_i$  tem deslocamentos independente dos anteriores (em termos de magnitude e direção). A probabilidade de um deslocamento cair no intervalo  $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i + d\mathbf{r}_i)$  é especificada por uma densidade de probabilidade descrita na equação (4.35). A ideia aqui é basicamente encontrar a probabilidade que após  $N$  passos a partícula se encontrará dentro do intervalo  $(\mathbf{R}, \mathbf{R} + d\mathbf{R})$ . Considerando primeiramente que a variação do movimento Browniano é a mais simples possível, a probabilidade de uma partícula que depois de  $N$  passos pode se encontrar em um determinado ponto  $m$  é dado

$$P(X, t)\Delta X = \left(\frac{1}{2\pi Dt}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{X^2}{4Dt}\right)\Delta X \quad (4.30)$$

Em que  $D = 2\nu l^2$ , sendo  $\nu$  o deslocamento em uma unidade de tempo,  $t$  o tempo analisado,  $l$  é o comprimento do passo,  $\Delta$  indica uma variação e  $X$  é o produto  $ml$  que denota um espaçamento.

A média dos espaçamentos e o desvio padrão das partículas são respectivamente

$$\langle m \rangle = 0, \sqrt{\langle m^2 \rangle} = \sqrt{N} \quad (4.31)$$

No caso em que  $N \gg 1$  e  $m \ll N$ , a equação (4.32) fornece a distribuição assintótica

$$P(m, n) = \left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m^2}{2N}\right) \quad (4.32)$$

### 4.9.1 Distribuição Gaussiana

Anteriormente, definiu-se uma distribuição capaz de descrever o mais simples trajeto do movimento Browniano. Essa seção está destinada a descrição da probabilidade de se encontrar uma partícula em um determinado intervalo de forma mais geral.

De forma generalizada, agora considerando um caminho randômico típico, cujas posições são determinadas pelos vetores  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$  e  $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i$  apresenta-se o método de Markov para o cálculo da probabilidade  $p_N(\mathbf{R})d(\mathbf{R})$  de uma partícula depois de  $N$  espaçamentos se encontrar em um intervalo  $(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i + d\mathbf{R}_i)$

$$p_N(\mathbf{R}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} A_N(\boldsymbol{\rho}) \exp(-i\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{R}) d\boldsymbol{\rho} \quad (4.33)$$

$$A_N(\boldsymbol{\rho}) = \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \tau_j(\mathbf{r}_j) \exp(i\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j \quad (4.34)$$

Em que  $\boldsymbol{\rho}$  é um vetor de  $N$  dimensões e  $A_N(\boldsymbol{\rho})$  é a transformada de Fourier da função  $\prod_{j=1}^N \tau_j(\mathbf{r}_j)$ . Com isso vemos que a solução geral para descrever o movimento Browniano depende da forma da densidade de probabilidade  $\tau_j(\mathbf{r}_j)$  para cada espaçamento. Neste contexto apresenta-se a distribuição Gaussiana.

Assumindo assim que a distribuição Gaussiana de deslocamentos permite obter exatamente a solução geral do caminho randômico para  $N \gg 1$ . A distribuição Gaussiana é dada por

$$\tau_j(\mathbf{r}_j) = \left( \frac{3}{2\pi \langle \mathbf{r}_j^2 \rangle} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left( -\frac{3|\mathbf{r}_j|^2}{2 \langle \mathbf{r}_j^2 \rangle} \right) \quad (4.35)$$

Em que  $\langle \rangle$  é o operador média e  $\mathbf{r}_j^2$  é o  $j$ -ésimo deslocamento elevado ao quadrado. A direção de cada vetor deslocamento pode ser arbitrária, desde que a (4.35) dependa da magnitude de  $\mathbf{r}$ , ou seja, de  $|\mathbf{r}_j|$ . E ainda  $\langle r^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle \mathbf{r}_j^2 \rangle$ .

Aqui assumiu-se que todos  $\tau_j(\mathbf{r}_j)$  são iguais ao  $\tau(\mathbf{r})$ . Neste caso pode-se obter uma expressão exata para a densidade de probabilidade  $p_N(\mathbf{R})$  até  $N \rightarrow \infty$ . Substituindo a equação (4.35) na equação (4.34) obtemos a equação (4.36)

$$A_N(\boldsymbol{\rho}) = \int_{-\infty}^{\infty} \tau(X, Y, Z) \exp(i(\rho_1 X + \rho_2 Y + \rho_3 Z)) dX dY dZ^N \quad (4.36)$$

Em que a integral da equação (4.36) é uma integral de volume.

Podemos ainda expandir o expoente em série de Taylor e após derivar a expressão tem-se

$$A_N(\boldsymbol{\rho}) = \exp\left( iN(\rho_1 \langle X \rangle + \rho_2 \langle Y \rangle + \rho_3 \langle Z \rangle) - \frac{1}{2} N Q(\boldsymbol{\rho}) \right) \quad (4.37)$$

Em que  $Q(\boldsymbol{\rho})$  possui uma forma quadrática. Mas antes, definiu-se um sistema de coordenadas em que os eixos se coincidem-se com as direções principais da forma quadrática. Enquanto  $Q(\boldsymbol{\rho})$  assume a forma da base canônica.

$$Q(\boldsymbol{\rho}) = \rho_\chi^2 \langle \chi^2 \rangle + \rho_\eta^2 \langle \eta^2 \rangle + \rho_\xi^2 \langle \xi^2 \rangle \quad (4.38)$$

Em que  $\langle \chi^2 \rangle$ ,  $\langle \eta^2 \rangle$  e  $\langle \xi^2 \rangle$  são os autovalores da matriz simétrica calculado através do determinante da subtração de uma matriz pelo produto de uma matriz identidade pelo autovalor, no caso  $\langle \chi^2 \rangle$ ,  $\langle \eta^2 \rangle$  e  $\langle \xi^2 \rangle$ .

Reescrevendo o vetor  $\mathbf{R}$  agora com componentes  $\mathbf{R}_\chi$ ,  $\mathbf{R}_\eta$  e  $\mathbf{R}_\xi$  e realizando algumas manipulações algébricas tem-se

$$p(\mathbf{R}) = \frac{1}{(8\pi^3 N^3 \langle \chi^2 \rangle \langle \eta^2 \rangle \langle \xi^2 \rangle)^{1/2}} \exp \left( -\frac{R_\chi - N \langle \chi \rangle}{2N \langle \chi^2 \rangle} - \frac{R_\eta - N \langle \eta \rangle}{2N \langle \eta^2 \rangle} - \frac{R_\xi - N \langle \xi \rangle}{2N \langle \xi^2 \rangle} \right) \quad (4.39)$$

Dessa forma obtemos a distribuição  $p(\mathbf{R})$  apresenta que a partícula experimenta um desvio sistemático do eixo principal, com flutuações  $N \langle \chi^2 \rangle$ ,  $N \langle \eta^2 \rangle$ ,  $N \langle \xi^2 \rangle$  se sobropondo.

## 4.9.2 Conjunto de partículas

Uma das entradas do código SIMS é o número de partículas contidas no agregado. Se  $N$  é um valor grande, as teorias probabilísticas sofrem algumas alterações devido a interação entre as partículas. Levando em consideração um conjunto de partículas,  $N \rightarrow \infty$ , a posição da partícula pode ser considerada como uma variável randômica contínua e uma densidade de probabilidade continua pode ser definida. Desde que o movimento Browniano ( $Pe \rightarrow \infty$ ) possa ser um processo de Markoviano, podemos utilizar a equação de Fokker-Planck para a função densidade de probabilidade de uma variável randômica. O processo Markoviano basicamente se resume em um processo do movimento aleatório, caótico, em pequena escala em que a partícula tem perda de memória. A equação de Fokker-Planck para uma distribuição isotrópica de partículas se resume em

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 p}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial Z^2} \right) \quad (4.40)$$

Pois, devido a simetria da distribuição, o tensor de difusão se resume em  $\mathbf{D} = D \mathbf{I}$  em que  $\mathbf{I}$  é um tensor identidade com componentes  $\sigma_{ij}$ .

## 4.10 Função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade

As flutuações de velocidade indicam basicamente o quanto a velocidade se afasta de sua média sendo esse um importante parâmetro a ser considerado no estudo da sedimentação de uma suspensão. Essa seção tem como foco principal o entendimento de como a memória pode ser adicionada ou retirada do agregado quando inserido efeitos associados à interações magnéticas entre as esferas. Define-se a função autocorrelação das flutuações de velocidade normalizada na equação (4.41) e tempo de correlação do sistema na equação (4.42)

$$R(t) = \frac{\langle u'(\tau) \rangle \langle u'(t + \tau) \rangle}{\langle u'(\tau)^2 \rangle} \quad (4.41)$$

e

$$\tau_c = \int_0^\infty R(t) dt \quad (4.42)$$

As equações (4.41) e (4.42) podem ser determinadas para a verificação das flutuações de velocidade do sistema em cada uma das três direções do espaço. As equações (4.41) e (4.42) são utilizadas para a compreensão da flutuação de velocidade em um determinado instante de tempo  $t$  pelo estado do sistema como um todo em um instante de tempo anterior, separados por um intervalo de tempo  $t$ , além de determinar também quanto tempo demora para que as flutuações de velocidade de um sistema não estejam mais acopladas com a estrutura deste em um instante de tempo anterior. Para processos Markovianos, como por exemplo movimento randômico, este tempo de correlação tende a zero e o estado futuro do sistema é aproximadamente independente das configurações anteriores. Este mesmo comportamento não ocorre em suspensões sujeitas à interações magnéticas e hidrodinâmicas, por exemplo.

Parte desse tópico consistiu na confecção de gráficos tanto para casos com interações magnéticas quanto para casos sem interações magnéticas a fim de calcular o tempo de correlação do sistema  $\tau_c$  e a função autocorrelação das flutuações de velocidades normalizada  $R(t)$  graficamente. Sendo essa parte discutida no relatório seguinte a este.

## 4.11 Média e variância

Nesta seção o conceito de média e variância serão introduzidos ao estudo do agregado bem como a significância dos valores apresentados.

O objetivo do estudo da dinâmica computacional destas suspensões tem como foco a obtenção de propriedades médias da suspensão, como velocidade média de sedimentação, flutuações de velocidade em sedimentação, magnetização dentre outras. A fim de se obter um bom perfil das propriedades do agregado, considerar um número suficientemente grande de partículas para que as propriedades médias de interesse, obtidas a partir de médias estatísticas, possam saturar, é uma condição necessária para que a estatística extraída das simulações seja fisicamente válida e significativa. Embora o problema de divergência possa ser resolvido considerando condições de contorno periódicas para a velocidade média de suspensão do agregado, outro problema ainda associado a parte estatística é da convergência da variância deste sistema. Estatisticamente falando descrevemos a variância de um sistema particulado como

$$\langle v'^2 \rangle_\alpha (j, t) = [v_\alpha(j, t) - \bar{v}(j, t)]^2 \quad (4.43)$$

Em que  $\alpha$  denota à realização;  $\bar{v}(j, t)$  é a velocidade média da suspensão em uma realização em um dado instante de tempo;  $v_\alpha(j, t)$  representa a velocidade de uma partícula  $\alpha$  e uma realização  $j$  em um dado instante de tempo  $t$ , enquanto  $\bar{v}(j, t)$  denota a velocidade média do sistema particulado em uma dada realização  $j$  e tempo  $t$ , sendo calculado por

$$\bar{v}(j, t) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N v_\alpha(j, t). \quad (4.44)$$

Para o cálculo da variância média, tem-se

$$\overline{v'^2}(t) = \frac{1}{N_{realizações}} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N_{realizações}} \sum_{\alpha=1}^N \langle v'^2 \rangle_\alpha (j, t). \quad (4.45)$$

Diversos trabalhos computacionais mostram a divergência da variância em simulações de muitos corpos interagindo hidrodinamicamente, como o de Cunha et.al (2002) e Caffish e Luke (1985). A

divergência da variância utilizando condições de contorno periódicas ainda é um problema não resolvido. A divergência da variância tem se destacado em diversos estudos experimentais, dos quais cita-se Nicolai e Guazzelli (1995), Bergougnoux (2003) e Segre et al. (1997), além do estudo da teoria como o de Koch e Shaqfeh (1991), Luke (2000) e Felderhof (2005).

Hipoteticamente, a divergência está associada a randomicidade da configuração espacial da suspensão, não importando o número de partículas consideradas na suspensão. De acordo com cálculos teóricos de Luke e Caffisch (1985) para uma suspensão de esferas distribuídas aleatoriamente os autores mostram a dependência da variância com o tamanho do sistema, contudo em análises experimentais como a de Nicolai e Guazzelli (1995) os autores obtiveram um valor de convergência para sistemas suficientemente grandes. Experimentalmente falando existe certa dificuldade em gerar distribuições perfeitamente randômicas em cima de várias realizações, pois uma suspensão com  $N$  esferas espera-se a se distribuir igualmente em torno de um eixo de simetria do recipiente físico, associado à um erro de  $+/-\sqrt{N}$  como mostrado na figura 4.13 de forma que exista uma nova condição inicial no experimento, e dessa forma, qualquer pequeno excesso ou falta de partículas em cada região será capaz de gerar um "desequilíbrio" da condição randômica, que levam a um valor convergente da variância da suspensão para um sistema com número de partículas suficientemente grande.

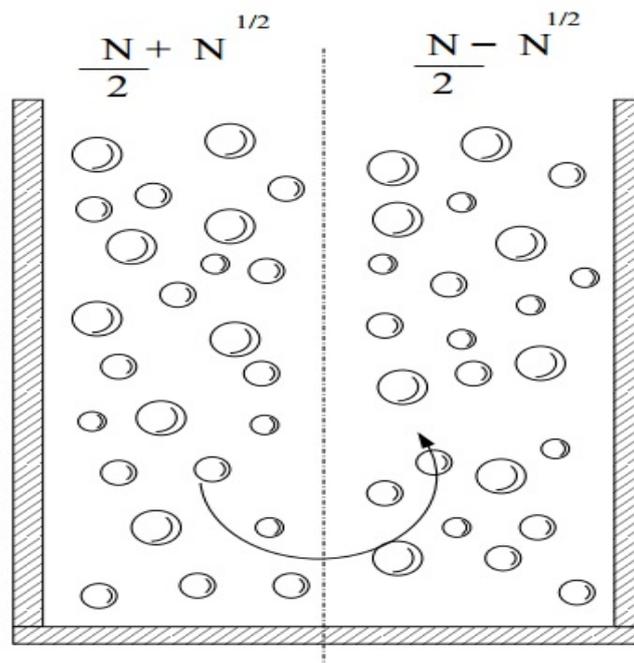


Figura 4.13: Geração de condições iniciais em laboratório com ligeiros desvios de uma condição totalmente randômica. Qualquer desequilíbrio seria suficiente para a quebra da randomicidade e por consequência medir a convergência da variância de uma suspensão, tese "Micromecânica e Microhidrodinâmica De Suspensões Magnéticas" (2013).

## CAPITULO 5

### ESTRUTURA DO CÓDIGO SIMS

Este capítulo é dedicado a formulação do código SIMS e explica de forma sucinta as subrotinas presentes no código. O código basicamente se divide em módulos que são os arquivos usados por outros arquivos que o código solicita. Basicamente o código funciona na seguinte ordem:

- SIMS.f90;
- Entrada  
Entrada.dat  
Entrada.f90;
- Principal.f90;
- Módulo  
Variáveis.f90  
Funções.f90;
- Saída.f90.

As figuras 9.1 e 9.2 em anexo ilustram de forma esquemática o funcionamento do arquivo principal e o arquivo "módulo" das funções do código SIMS. Em paralelo, aqui são descritas as funções e estrutura do código SIMS.

### 5.1 Simulação da sedimentação de um agregado de partículas em um fluido viscoso ( $Re \ll 1$ )

#### 5.1.1 Arquivo principal

##### Arquivo Makefile

- Arquivo responsável por chamar os outros arquivos para executar o programa.
- Aceita compilação para GNU/Linux ou Compilador: GNU gfortran.

##### Arquivo SIMS

- Início do código.
- Responsável por chamar o arquivo de entrada e o arquivo principal (resumidamente).
- Calcula o tempo de simulação.
- Chama a parte estatística do programa.

#### **Arquivo Entrada.f90**

- Subrotina que lê os dados fornecidos pelo arquivo entrada.dat.
- Lê dados com periodicidade ou não. ex: forças magnéticas, torque magnético e ligaih.

#### **Arquivo principal.f90**

- Subrotina que inicia o programa de fato.
- Realiza o tratamento estatístico.
- Aloca as variáveis na memória.
- Utiliza os módulos.

#### **Arquivo Entrada.dat**

- Arquivo no qual são escolhidos os parâmetros que queremos calcular.
- Baseado em variáveis lógicas (true or false).
- Parâmetros físicos e dados numéricos.

**Módulos:** Arquivos que vão ser usados por outros arquivos.

**Variáveis:** Arquivo f.90 que contém todas as variáveis usadas no programa SIMS.

**Funções:** Arquivos f.90 que contém as funções (subrotinas) que vão ser chamadas no arquivo principal do SIMS e realizar a simulação de fato.

#### **Arquivo saída.f90**

- Arquivo que faz o tratamento estatístico.
- Média, variância, autocorrelação das flutuações, coef. de difusão e erro.

#### **Gerar arquivos .txt**

- Gera os arquivos de texto de velocidade, posição e outros em formato de coluna para cada realização do experimento.

### **5.1.2 Arquivo Funções**

#### **Módulo e Funções**

##### **Subrotina tabelagreen**

- Serve para pré-calculer a função de Green que é usada para calcular as interações periódica feita para diminuir o custo computacional.
- Calcula todas as ordens de todas as possibilidades de distância entre as partículas.

- Calcula as funções usadas para calcular as iterações hidrodinâmicas, torque e forças magnéticas com reciprocidade ou não.

**Subrotina interpola\_reciproco**

- Subrotina responsável por interpolar os valores pré- calculados das funções de Green.

**Subrotina estrutura\_periodica**

- Responsável por criar a estrutura e a configuração inicial física de todos os boxes.
- Imprime o número de boxes.
- Número de boxes recíprocos.

**Subrotina Intper**

- Essa subrotina calcula todas as funções periódicas.
- Inicialmente faz a soma real dos espaços.
- Calcula o vetor distância das partícula e o seu versor.
- Checa a distância entre as partículas dos boxes.
- Realiza interpolações dos valores pré-calculados das funções de Green.
- Soma de todas as interações.
- Subrotina de grande importância.

**Subrotina gera\_arquivos**

- Responsável por criar todos os arquivos finais em .txt (posição, velocidade e etc).

**Subrotina condição\_inicial**

- Verifica se existe overlap de partículas na geração da condição inicial.
- Calcula o centro de massa do agregado.
- Garante que não haja overlap de partícula na condição inicial.

**Subrotina repulsão**

- Aplica uma força de repulsão para que não haja overlap de partículas.
- Dada uma determinada condição de distância.

**Subrotina brownian**

- Subrotina responsável por calcular forças e torques Brownianos.

**Subrotina torque\_magnético**

- Subrotina que calcula os torques magnéticos não periódicos.
- Possui uma variáveis lógica (true or false) "mistura".
- Se "mistura"= true, temos que definir um zero de dipolos para uma determinada percentagem "percentual" das partículas.

- Esta subrotina pode considerar um leito fluidizado magnético mistura de partículas magnéticas e não magnéticas, a variável lógica "Mistura"ativa esta possibilidade.

**Subrotina contato**

- Subrotina responsável por calcular as forças de contato.

**Subrotina campo\_externo**

- Subrotina responsável por adicionar campo externo.
- Chama a variável lógica "mistura".
- Esta subrotina pode considerar um leito fluidizado magnético mistura de partículas magnéticas e não magnéticas, a variável lógica "Mistura"ativa esta possibilidade.
- Considera campo superior, inferior e lateral direita.

**Subrotina torque\_externo**

- Relacionado a variável "mistura".
- Considera os torques devidos aos campos superior, inferior e nas laterias.

**Subrotina força\_magnética**

- Vetor que liga as partículas em "i"e "j".
- Calcula-se a distância entre a partícula em questão e as outras partículas.

**Subrotina distribui\_dipolo**

- Condição "dipolo\_ordenado"ou "mistura".
- Normalização de vetores.

**Subrotina resvel**

- Componente de velocidade em questão.
- Passo de tempo.
- Número de Stokes.
- Somatório das demais forças na direção considerada.
- Vale 0 ou 1, se for zero não considera empuxo líquido, se for 1 considera.
- Variáveis internas utilizadas para o runge-kutta de quarta ordem.

**Subrotina inverte\_matriz**

- Matriz mobilidade.
- Matriz resistência.
- Matriz cofator.
- Transposta da matriz cofator.

- Determinante da matriz mobilidade.

**Subrotina resvel\_sem\_inercia**

- Componente de velocidade em questão.
- Somatório das demais forcas na direção considerada
- Vale 0 ou 1, se for zero não considera empuxo líquido, se for 1 considera.

**Subrotina resomega**

- Componente de velocidade em questão.
- Passo de tempo.
- Número de Stokes rotacional.
- Somatório dos demais torques na direção considerada.
- Variáveis internas utilizadas para o runge-kutta de quarta ordem.

**Subrotina resomega\_sem\_inercia**

- Componente de velocidade angular em questão.
- Somatório dos demais torques na direção considerada.

**Subrotina evoldip**

- Momento de dipolo atual da partícula na direção considerada.
- Momento de dipolo atual da partícula na direção j.
- Momento de dipolo atual da partícula na direção k.
- Velocidade angular da partícula na direção j.
- Velocidade angular da partícula na direção k.
- Passo de tempo numérico.

**Subrotina respos**

- Posição.
- Passo de tempo.
- Componente de velocidade em questão.
- Variáveis internas utilizadas para o runge-kutta de quarta ordem.
- Condicional Browniano.

**Subrotina randomica**

- Range do número randômico.
- Sequência randômica gerada.

- Variável de alocação "seed".

**Subrotina fator estrutura**

- Definindo o número de vetores de onda.
- Criando os vetores  $n_k$  para várias direções possíveis do número de onda vetor.
- Cálculo do fator estrutura para vários vetores de onda números.
- Calculando os números de onda correspondentes para cada sentido e fazendo a média do fator de estrutura para todas as realizações.

**Subrotina ordem crescente**

- Põe na ordem crescente.

**Subrotina media\_ativa**

- Tirar uma média de parte do sistema sem efeitos de parede.

**Subrotina contagem ativa**

- Conta quantas partículas estão na parte ativa.

**Subrotina acopla\_particulas**

- Acoplando a variável das partículas que pertencem a um mesmo agregado, esta variável pode ser Força, torque ou dipolo.

**Subrotina análise\_de\_agregados**

- Contando o numero de agregados com N particulas.
- Chama fdp\_agregados.

**Subrotina fdp\_agregados**

- Função distribuição de probabilidade do agregado.

## CAPITULO 6

### DIAGRAMA DE BLOCOS

Tendo apresentado a estrutura resumida do código no capítulo 5 deste relatório, este capítulo foi criado para introduzir o conceito literário de diagrama de blocos, que são frequentemente utilizados por programadores, a fim de tornar mais fácil a compreensão de um determinado programa computacional por terceiros.

A tabela 6.1 apresenta algumas das principais simbologias utilizadas para a confecção de diagramas de blocos.

Tabela 6.1: Simbologia - Diagrama de blocos

↓	Fluxo de dados
	Indica o sentido de dados. Conecta os demais símbolos.
○	Terminal
	Indica o início ou fim de um processamento.
□	Processamento
	Processamento de dados.
▱	Entrada/Saída
	Operação de entrada e saída de dados.
○	Desvio
	Permite o desvio para um ponto qualquer do programa.
▵	Entrada manual
	Indica entrada de dados via teclado.
▭	Exibir/Saída
	Mostra informações ou resultados.
◇	Decisão
	Permite elaborar processos de decisão.
◩	Conector de página
	Permite informar de qual página vem o fluxograma.

Com base na simbologia padrão, o diagrama de blocos para o código SIMS foi confeccionado de forma resumida e encontra-se em anexo.

## CAPITULO 7

### UM ESTUDO PRELIMINAR PARA UM AGREGADO NÃO MAGNÉTICO

O presente relatório apresenta um trabalho experimental a fim de verificar a veracidade e confiabilidade do código SIMS que simula a sedimentação do agregado de partículas, Gontijo et al. (2015). A configuração da bancada experimental foi esquematizada conforme a figura 7.1 A bancada

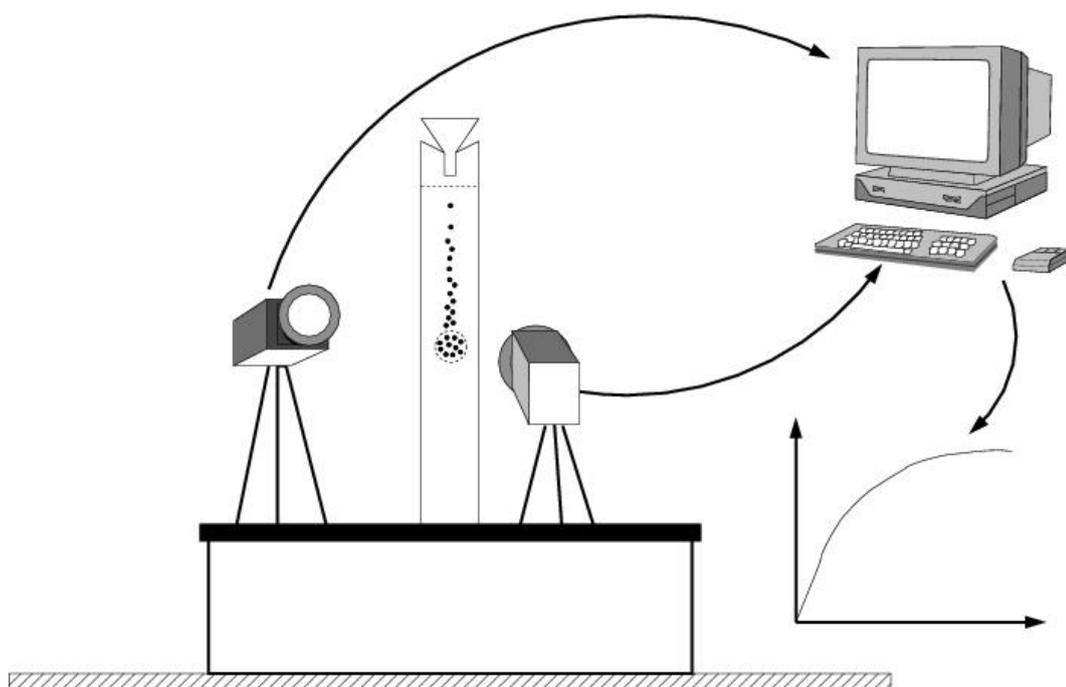


Figura 7.1: Esquemática experimental da coluna de sedimentação.

experimental consiste na utilização de duas câmeras digitais de alta definição (Sony HDR-PJ230), uma coluna de acrílico preenchida com óleo de silicone suficientemente longa com o objetivo de minimizar efeitos de parede e um computador com programas que auxiliam a análise dos vídeos gravados (Matlab toolboxes e CVmob). O experimento consiste basicamente na filmagem da sedimentação de um agregado inicialmente formado no topo da coluna de sedimentação. Quando o agregado esférico é formado, as duas câmeras posicionadas estrategicamente iniciam a filmagem e captam a sedimentação do agregado. A ação da força gravitacional faz com que as partículas sedimentem formando novas morfologias de agregado Hogan. Jr (2011). Interações microhidrodinâmicas e ação de campo externo, também são fatores que influenciam na sedimentação do agregado. A ideia é a analisar o

comportamento das esferas quando essas interagem entre si e com o meio externo. A fim de caracterizar a sedimentação, realizou-se um estudo detalhado sobre as propriedades das partículas usadas no experimento juntamente com o óleo de silicone usado para preencher a coluna. A figura 7.2 mostra imperfeições presentes na esfera o que pode causar torques e outros mecanismos de interação entre as partículas do agregado e o fluido.

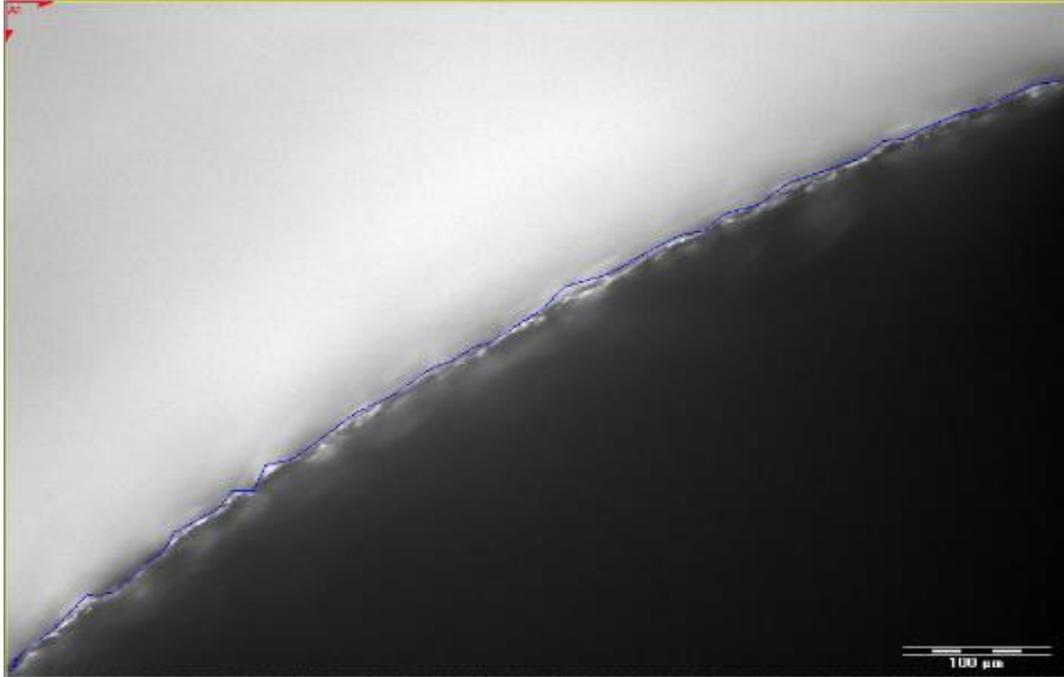


Figura 7.2: Imperfeições superficiais presentes na esfera.

O diâmetro médio das esferas é  $999.78 \mu_m \pm 110.45 \mu_m$  e sua massa específica  $\rho_s = 7.92 \left[ \frac{g}{cm^3} \right]$ . A figura 7.3 apresenta a distribuição de probabilidade e convergência do valor descrito para o diâmetro médio das esferas. Rosa e Gontijo (2015).

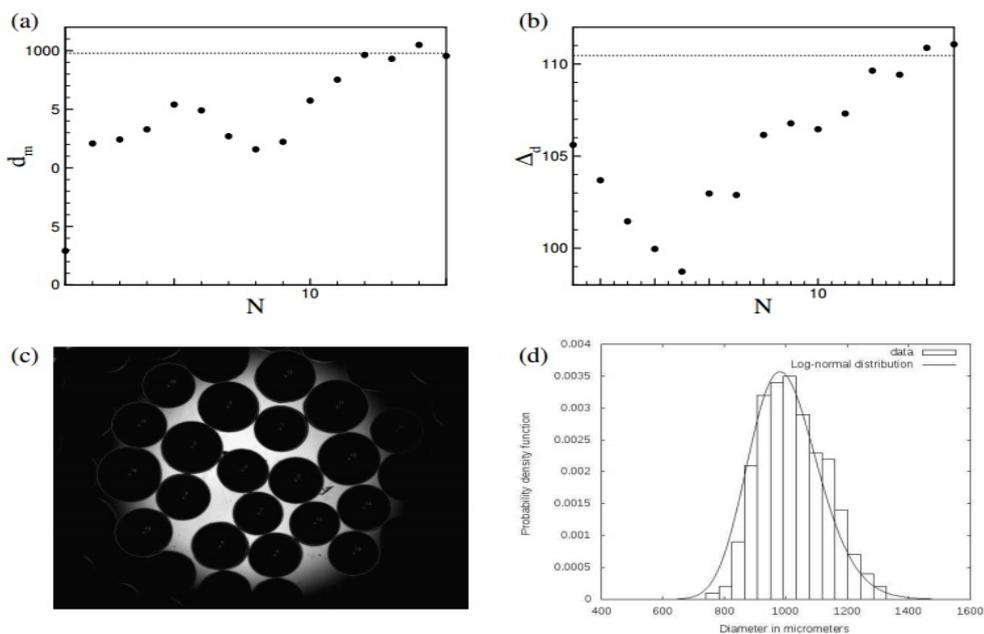


Figura 7.3: Diâmetro médio das partículas.

Com o objetivo de verificar a viscosidade do óleo de silicone obtido comercialmente, o experimento de Stokes foi realizado. Para escoamentos de uma partícula sólida sedimentando em um fluido viscoso com  $Re \ll 1$ , podemos obter importantes informações sobre as propriedades de interação fluido-partícula. Dessa forma, podemos utilizar a equação (1.5). Com auxílio do programa CVmob, a velocidade terminal média do agregado foi obtida. Reorganizando os termos da equação (1.5) para se obter a viscosidade  $\mu$  obtemos finalmente que  $\mu = 64[Pa \times s]$ .

Com base em experimentos e simulações realizados, Cerqueira et al. (2015) obtiveram resultados que serão discutidos a seguir.

Os resultados numéricos foram obtidos pelo código SIMS feito por Gontijo (2013) onde considerou-se interações periódicas, força gravitacional, interações hidrodinâmicas e a condição inicial de um agregado esférico. A figura 7.4 ilustra uma imagem típica do agregado formado para um determinada fração volumétrica e número de partículas.



Figura 7.4: Imperfeições superficiais presentes na esfera.

A configuração numérica utilizada para o agregado consiste em um fração volumétrica de  $\phi = 0,159$ , Um total de 1520 partículas e 10 tempos de Stokes.

Para os casos numérico (obtido através do código SIMS) e experimental, uma considerável mudança no modelo do agregado induzida pela interações hidrodinâmicas foi observada. Algumas diferenças entre a configuração numérica do código e a configuração experimental podem ser citadas. Na configuração experimental podemos observar a influência da parede presente no fundo da coluna de acrílico o que basicamente faz com o que uma fração do agregado mantenha-se presa ao conjunto. Em outras palavras, as forças hidrodinâmicas entre a parede inferior e as partículas do agregado tendem inibir a formação de pequenos agregados. Ainda referente ao experimento, vale ressaltar que as partículas aqui usadas são polidispersas. Na configuração numérica os efeitos de parede não são considerados e ainda as partículas do agregado são monodispersas. Um importante fenômeno observado é o escape de partículas do agregado, induzidas por interações hidrodinâmicas internas dentro do agregado. O escape de partículas pode ser fitado por um parâmetro  $k'$  Abade e Cunha (2007) onde o número de partículas que se desprendem do agregado escala com

$$\Delta N \sim N_o \left[ 1 - \frac{1}{(1 + k' t)^2} \right], \quad \text{onde } k' \sim \frac{3}{8} \sqrt{N_o} \epsilon_{\text{área}}^2 \quad (7.1)$$

Onde  $N_o$  é o número de partículas iniciais,  $k'$  é a constante relacionada a intensidade de flutuação de velocidade do agregado,  $t$  é o tempo e  $\epsilon_{\text{área}}$  é a área projetada do agregado.

A figura 7.5 apresenta a relação entre o escape de partículas obtido experimentalmente com a relação teórica descrita por Abade e Cunha (2007).

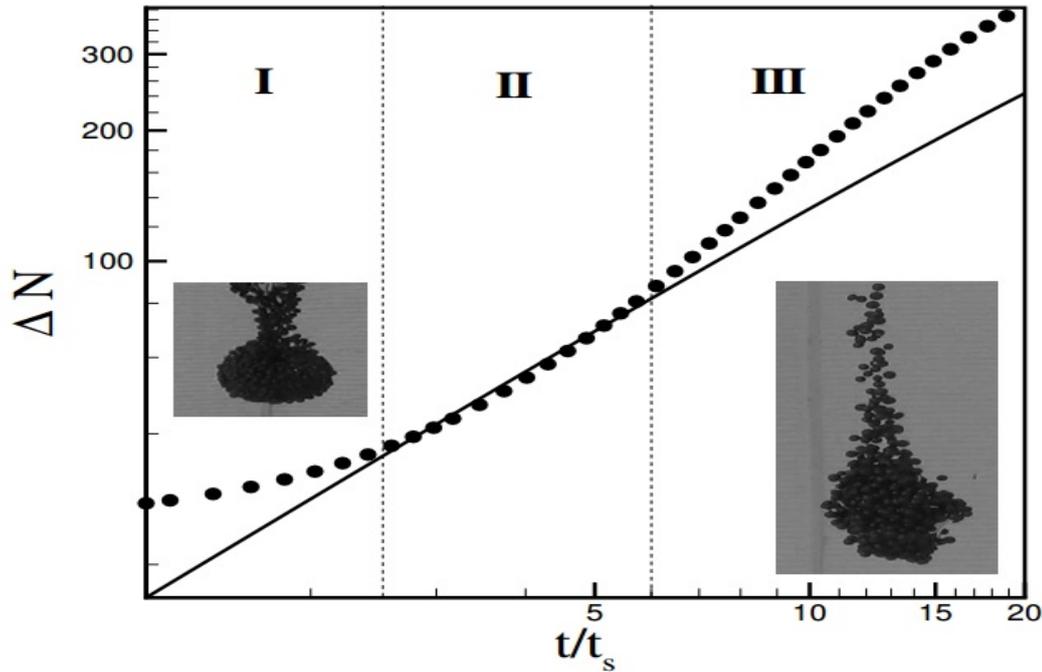


Figura 7.5: Escape de partículas de um agregado sedimentando em um fluido viscoso.

São definidas três regiões na figura 7.5. A primeira região apresenta o começo do processo de sedimentação. Nessa região podemos observar que a curva experimental se afasta da curva obtida através da lei de escala proposta por Abade e Cunha (2007). Isso acontece devido a geração da condição inicial que laboratorialmente seria impossível reproduzi-lá perfeitamente. Na segunda região observa-se que as curvas se coincidem, ou seja, existe uma tendência experimental em obedecer a lei de escala, tem-se também que o agregado já se encontra bem definido após a região de formação da condição inicial. Para a terceira região especula-se que estas discrepâncias estão relacionadas com o processo de contagem que usa uma vista bidimensional de um vídeo para contar as partículas. Mesmo utilizando duas câmaras para evitar a perda de informação em planos diferentes há probabilidade de perder a contagem de uma partícula.

A figura 7.6 apresenta em algumas regiões a forma que o agregado assume ao longo do tempo. Na primeira região (I) descrita observamos o início do processo de sedimentação. O desvio inicial está relacionado a geração da condição inicial do agregado que é de certa forma desordenada. A segunda (II) região apresenta uma boa aproximação entre a lei de escala de Abade e Cunha (2007) e o trabalho realizado neste relatório. Para longos períodos de tempo as incertezas na contagem das partículas que escapam aumentam como podemos observar na região (III). Especula-se que a incerteza observada relaciona-se com a configuração proposta para o experimento, ou seja, devido ao posicionamento das câmaras, erros de paralaxia, entre outros o que pode ter ocasionado algum erro na contagem de partículas que escapam por um plano onde não foi possível capturá-lo com a disposição das câmaras.

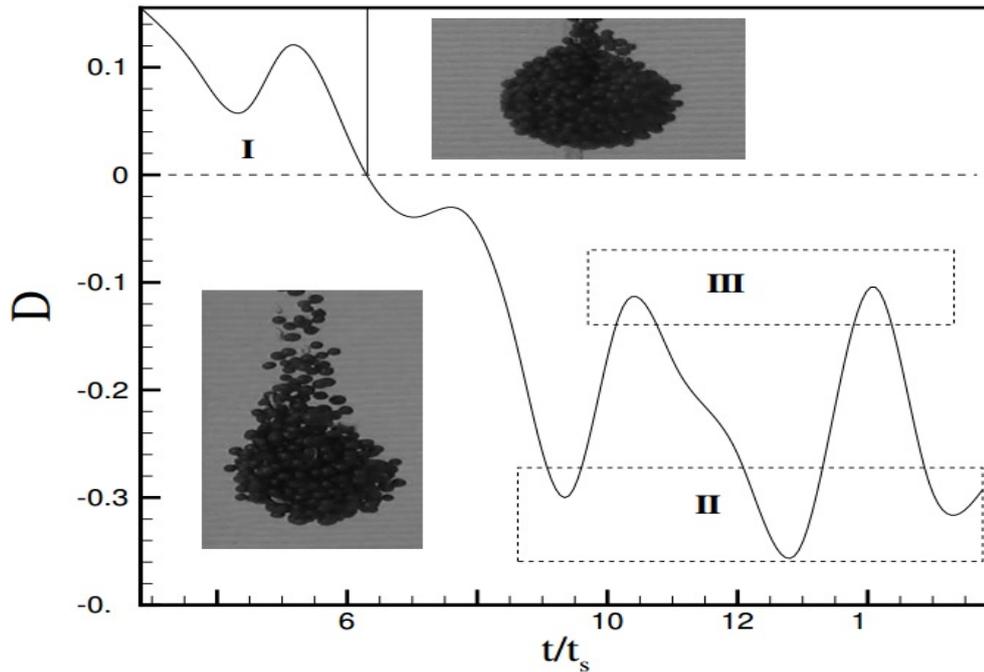


Figura 7.6: Deformação do agregado.

Outro ponto de grande importância estudado é a razão de anisotropia do agregado proposta por Taylor e Acrivos (1964). A equação (7.2) mostra como calcula-se a quão simétrica é a área projetada do agregado.

$$D_{anis} = \frac{A - B}{A + B} \quad (7.2)$$

Onde  $A$  é o raio horizontal do agregado e  $B$  o raio vertical. Para o caso de  $D = 0$  temos um círculo perfeitamente simétrico. Se  $D > 0$  o agregado está alongado horizontalmente o que pode significar a presença de uma parede na parte inferior do agregado. Se  $D < 0$  o agregado está alongado na direção vertical. Experimentalmente pode-se observar que a razão de anisotropia é um função do tempo. Conforme o agregado sedimenta pequenos agregados se desprendem e causam os picos e vales observados na regiões II e III na figura 7.6. Em  $t/t_s = 6.5$  podemos observar que o agregado está bem definido ( $D = 0$ ), ou seja, está praticamente perfeitamente simétrico.

## CAPITULO 8

### DESCRIÇÃO DOS ALGORITMOS DESENVOLVIDOS

Este capítulo destina-se à descrição das rotinas utilizadas para o código SIMS. As rotinas descritas neste capítulo foram criadas no software MatLab e foram implementadas com o objetivo de otimizar e de comparar os resultados obtidos experimentalmente na versão anterior a este relatório com os resultados obtidos pelo código SIMS.

#### 8.1 Algoritmo para a contagem de partículas que escapam do agregado

Nesta seção será apresentado e discutido o algoritmo criado para a contagem de partículas que escapam do agregado conforme o desenvolver do mesmo.

A rotina utilizada basicamente calcula a distância entre as partículas, sendo cada uma delas consideradas como uma partícula teste e determina através de uma fronteira definida no próprio código o que está dentro ou fora do agregado. A ideia inicial para o programa que realiza a contagem das partículas que pertencem ao agregado não foi utilizada (ver capítulo 4), devido a fatores que poderiam tornar muito mais complexa a construção do algoritmo. Ficamos, portanto, com o programa descrito neste capítulo. A figura 8.1 apresenta a configuração do agregado e o que foi utilizado para a confecção da rotina.

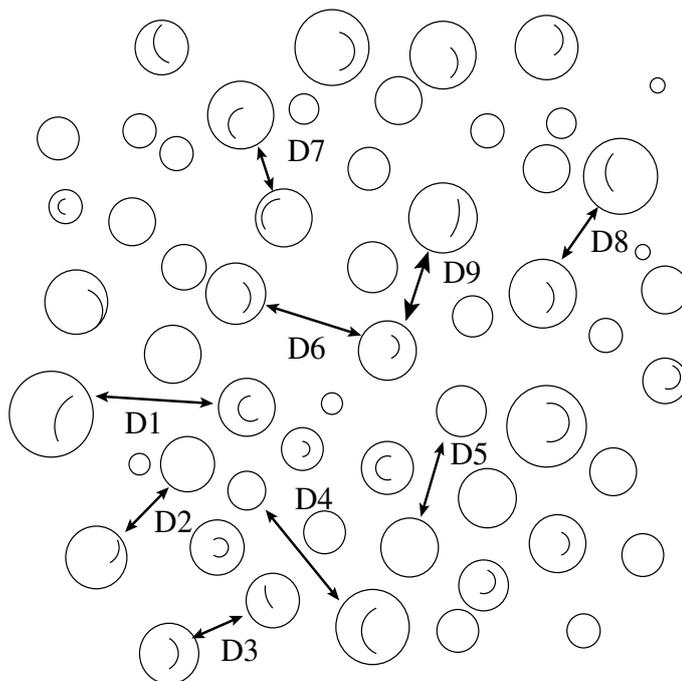


Figura 8.1: Representação utilizada para a confecção da rotina.

Através do cálculo das distâncias entre as partículas, é possível se obter, por meio da condição inicial, o diâmetro do agregado. Inicialmente o agregado é perfeitamente esférico e então temos que a maior distância entre as partículas teste calculada adicionado do raio da partícula é igual ao diâmetro é igual ao diâmetro do agregado. A figura 8.2 ilustra a lógica do código criado.

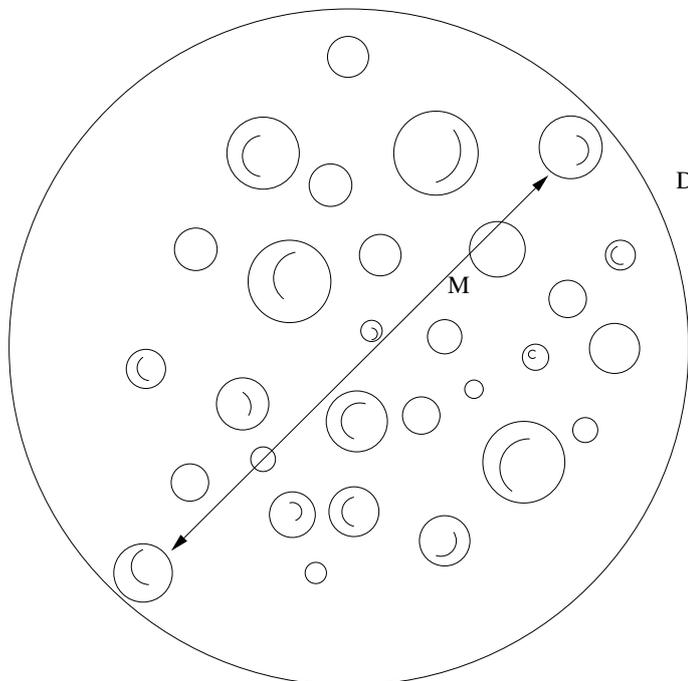


Figura 8.2: A figura apresenta a lógica de funcionamento do código proposto.

Em que  $M$  é a maior distância entre as partículas e  $D$  é a fronteira do agregado (diâmetro).

Obtendo o diâmetro inicial do agregado, somos capazes de estabelecer uma fronteira para definir quais partículas pertencem ou não ao agregado. A cada zona de tempo que o código imprime, obtém-se um determinado grupo de posições das partículas do agregado. A partir de um comando condicional

do código, compara-se a distância entre as partículas com o diâmetro do agregado que obtemos pela condição inicial. Embora o agregado sofra variações em seu diâmetro conforme o agregado sedimenta, é razoável utilizar o diâmetro inicial para realizar a comparação com as distâncias descritas anteriormente (resultados experimentais realizados na etapa inicial deste projeto).

A condição inicial do agregado é feito por meio da distribuição randômica de partículas no espaço que se ordenam de forma perfeitamente esférica. Verifica-se também no código SIMS se a menor distância entre duas partículas é menor que duas vezes o raio delas adicionado de um filme de fluido, dessa forma, caso isso seja verdade para algum par de partículas, existe uma função no código que aplica um *kick* Browniano para que não exista qualquer superposição de partículas.

Com base em resultados experimentais obtidos anteriormente (ver capítulo 6), podemos verificar que os resultados obtidos por meios computacionais divergem dos resultados experimentais. Embora não sejam resultados completamente distintos, podemos explicar a discrepância dos resultados por meio de fatores reais que a ferramenta computacional não considera. Podemos citar por exemplo o fato do código trabalhar com suspensões monodispersas e a não existência de parede. Ambos fatores não podem ser desconsiderados ou manipulados, contudo, observa-se que existe uma tendência da rotina acompanhar a curva de escape de partículas obtido experimentalmente.

Com o objetivo de validar o código, foi realizado alguns testes com o mesmo juntamente com uma discussão dos resultados obtidos tanto numericamente como experimental.

Utilizou-se o algoritmo desenvolvido para o cálculo do escape de partículas para uma configuração de  $N = 30$  partículas, com  $\phi = 0,01$ ,  $\Delta t = 5$  e *iteração* = 1. Em que  $\phi$  = fração volumétrica do agregado,  $N$  = número de partículas e  $\Delta t$  = passo de tempo. A figura 8.3 foi obtida por meio dos dados fornecidos pelo SIMS para a configuração descrita neste parágrafo.

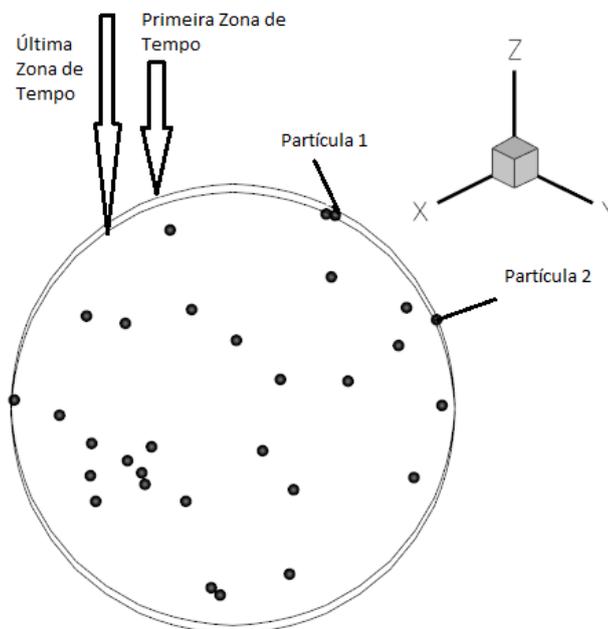


Figura 8.3: Agregado com  $N = 30$  partículas, submetido a ação da gravidade.

A contagem realizada por meio da rotina desenvolvida apresenta o escape de 2 (duas) partículas do agregado para a zona de tempo final calculada no código SIMS. Com auxílio da figura 8.3, também podemos contar duas partículas fora da região inicial do agregado.

Com dito anteriormente, a rotina foi desenvolvida inicialmente no software MatLab. A mesma encontra-se no apêndice deste relatório.

## 8.2 Algoritmo de identificação das partículas que não pertencem ao agregado

Em paralelo a rotina criada para a contagem de partículas que escapam do agregado, foi criado outro algoritmo para identificar as partículas que não pertencem mais a um determinado agregado. Esta seção destina-se a descrição do algoritmo utilizado.

O algoritmo consiste em definir um vetor que é criado com base nos máximos valores de distâncias entre as partículas. Esses valores utilizados para criar tal vetor são resultados de um comparação com o diâmetro inicial definido por meio de uma condição inicial perfeitamente esférica do agregado. Esta comparação refere-se ao valor máximo das distâncias entre as partículas. Através de uma comparação binária com o vetor criado, obtemos o valor desejado. A figura 8.4 apresenta esquematicamente a lógica utilizada para o algoritmo.

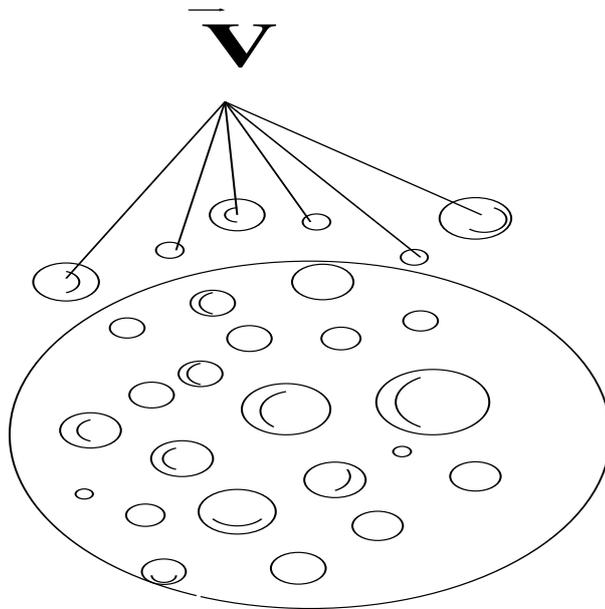


Figura 8.4: Representação das partículas que não estão fora do agregado.

Em que o vetor  $\mathbf{V}$  armazena a posição das partículas que escaparam do agregado. A rotina utilizada para essa seção encontra-se em apêndice.

## CAPITULO 9

### CONCLUSÕES

Em síntese, o presente relatório consistiu em apresentar o funcionamento do código SIMS, Gontijo (2013), bem como verificar a literatura referente as ferramentas utilizadas no código. O código é capaz de realizar a simulação da sedimentação de um agregado monodisperso considerando periodicidade, análise estatística e interações hidrodinâmicas. Vale ressaltar que o código desconsidera efeitos de parede.

Neste relatório também foi estudado de forma experimental e numerica a sedimentação de um agregado composto por partículas de ferro com determinado diâmetro médio, em um fluido de viscosidade elevada. Numericamente esse parâmetro de viscosidade elevada é representada pelo número de Reynolds tendendo a zero, bem como a adimensionalização de comprimentos, velocidade e massa específica que o código SIMS considera. Em ambas as formas de estudo os resultados obtidos para o escape de partículas ao longo do tempo foram analisados e discutidos. Novas subrotinas foram criadas para o código SIMS a fim de otimizá-lo. As subrotinas criadas são o escape de partículas e a identificação do agregado que escapa.

Alguns casos particulares também foram simulados, como o agregado submetido ao cisalhamento simples e ao cisalhamento oscilatório. Pode-se observar que o código imprime maior deformação no agregado conforme o aumento de  $\dot{\gamma}$  validando assim a subrotina proposta no código.

Através da extensa referência bibliográfica realizada para a confecção deste relatório, pode-se observar as aplicações que o estudo em questão é capaz de fornecer ao pesquisador. Dentre elas podemos citar aplicações na medicina e biologia além de outras áreas citadas no primeiro capítulo deste relatório.

De forma pragmática e explicativa, as ferramentas matematico-estatísticas e de interações hidrodinâmicas utilizadas nas subrotinas do código SIMS foram descritas neste relatório por meio do diagrama de blocos.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1 ] Gontijo, Rafael - Micromecânica e Microhidrodinâmica De Suspensões Magnéticas (2013).
- [2 ] First passage calculation of the conductivity of particle aggregate-laden suspensions and composites - Thaseem Thajudeen, Christopher J. Hogan Jr. [U+204E] Department of Mechanical Engineering, University of Minnesota, Minneapolis, MN, USA.
- [3 ] Simulation of Particle Aggregate Dynamics in a Viscous Fluid - S. I. Martynov and L. Yu. Tkach Yugorsk State University, ul. Chekhova 16, Khanty Mansiysk, Tyumen oblast, 628012 Russia.
- [4 ] Collision of a rising bubble-particle aggregate with a gas-liquid interface - Peter M. Ireland [U+204E], Graeme J. Jameson - Centre for Advanced Particle Processing, School of Engineering, University of Newcastle, NSW 2308 Australia - Centre for Multiphase Processes, University of Newcastle, NSW 2308 Australia.
- [5 ] Aggregation of nanoparticles in a block copolymer bilayer Houyang Chen, Eli Ruckenstein - Department of Chemical and Biological Engineering, State University of New York at Buffalo, Buffalo, NY 14260-4200, USA.
- [6 ] The effect of particle aggregate shape on ultrasonic anisotropy in concentrated magnetic fluids - T Hornowski, A Józefczak, B Kołodziejczyk, M Timko, A Skumiel and M Rajnak2 -Institute of Acoustics, Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University, Umultowska 85, 61-614 Poznań, Poland - Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovakia.
- [7 ] Magnetic confinement of Brownian rotation to a single axis and application to Janus and cluster microparticles Brandon H. McNaughton, Miri Shlomi, Paivo Kinnunen, Codrin Cionca, Shao Ning Pei, Roy Clarke, Panos Argyrakakis, and Raoul Kopelman.
- [8 ] An irregular pore network model for convective drying and resulting damage of particle aggregates Abdolreza Kharaghani, Thomas Metzger, Evangelos Tsotsas.
- [9 ] Investigation and visualization of internal flow through particle aggregates and microbial flocs using particle image velocimetry Feng Xiao, Kit Ming Lam, Xiao-yan Li.
- [10 ] The size of particle aggregates produced by flocculation with PNIPAM, as a function of temperature - Elizaveta Burdukova, Naoyuki Ishida, Timothy Shaddick, George V. Franks.
- [11 ] Three-dimensional CFD simulation of the flow field around and through particle aggregates - F. Xiao, X.Y. Li, D.S. Wang.

- 
- [12 ] Mechanical load on a particle aggregate in mono-axial elongational flow - Christoph Hartmann, Antonio Delgado.
- [13 ] Fractal dimension of aggregates formed in the slip regime - Lech Gmachowski.
- [14 ] Aggregate restructuring by polymer solvency effects - Alvin Y. Huang, John C. Berg.
- [15 ] Characteristics of aggregates formed by electroflocculation of a colloidal suspension - T. Harif, A. Adin.
- [16 ] Fractal dimension of asphaltene aggregates determined by turbidity - Lech Gmachowski, Maciej Paczuski.
- [17 ] Structure factor of ferrofluids with chain aggregates: Theory and computer simulations - Elena Pyanzina, Sofia Kantorovich, Juan J. Cerd, Christian Holm.
- [18 ] Dynamic Structure Factor for Large Aggregate Clusters with Internal Motions: A Self-Consistent Light-Scattering Study on Conjugated Polymer Solutions - Yu H. Wen, Po C. Lin, Chi C. Hua and Show A. Chen.
- [19 ] Comments on the Radial Distribution Functions and Structure Factors of Aggregates: Fractal and Non-Fractal Approaches - M. Cattani, M.C.Salvadori and F.S.Teixeira.
- [20 ] Aggregate Breakup in a Contracting Nozzle - Miroslav Soos, Lyonel Ehrl, Matthias U. B abler and Massimo Morbidelli.
- [21 ] Shape dependence of the radial distribution function of hydration water around proteins -Pooja Rani and Parbati Biswas Department of Chemistry, University of Delhi, Delhi-110007, India.
- [22 ] Hard-sphere radial distribution function again - Andrij Trokhymchuk, Ivo Nezbeda, Jan Jirsák, and Douglas Henderson.
- [23 ] A fully three-dimensional model of the interaction of driven elastic filaments in a Stokes flow with applications to sperm motility - Julie Simons, Lisa Fauci, Ricardo Cortez.
- [24 ] Lifetime of a cluster of spheres settling under gravity in Stokes flow - Maria L. Ekiel-Je' zewska and Eligiusz Wajnryb - Institute of Fundamental Technological Research, Polish Academy of Sciences, Pawi' nskiego 5B, PL-02-106 Warsaw, Poland.
- [25 ] Force-moment line element method for flexible slender bodies in Stokes flow - H. Jiang and B. Yang - Department of Mechanical and Aerospace Engineering, University of Texas at Arlington, Arlington, Texas 76019, USA.
- [26 ] Lateral migration of a spherical capsule near a plane wall in Stokes flow - S. Nix, Y. I ma i, D. Matsunaga, T. Yamaguchi and T. Ishikawa - Department of Biomedical Engineering, Tohoku University 6-6-01 Aramaki-aza Aoba, Aoba-ku, Sendai 980-8579, Japan - Department of Bioengineering and Robotics, Tohoku University 6-6-01 Aramaki-aza Aoba, Aoba-ku, Sendai 980-8579, Japan.
- [27 ] Nonlinear dynamics of spherical particles in Poiseuille flow under creeping-flow condition - S. Reddigand H. Stark.

- 
- [28 ] Hydrodynamic Irreversibility in Creeping Flow - E. G. Flekkøy, T. Røge, U. Oxaal, and J. Feder  
- Department of Physics, University of Oslo, P.O. Box 1048 Blindern, 0316 Oslo 3, Norway.
- [29 ] A. Einstein, Ann. Phys. 324. 371 (1906);
- [30 ] Russel, Saville and Schowalter - Colloidal Dispersions - Cambridge;
- [31 ] E. Guazzelli and L. Oger - Mobile Particulate Systems;
- [32 ] Sinaiski . Zaichik - Statistical Microhydrodynamics - Wileyvch;
- [33 ] McQuarrie, Donald A. - Statistical Mechanics.
- [34 ] Creepingow over spherical permeable aggregates - Marco Vanni - Dipartimento di Scienza dei  
Materiali e Ingegneria Chimica, Politecnico di Torino Corso Duca degli Abruzzi 24, 10129 Torino,  
Italy Received 10 June 1998; accepted 29 March 1999
- [35 ] Dynamic numerical simulations of magnetically interacting suspensions in creepingflow - R.G.  
Gontijo, F.R. Cunha
- [36 ] A Generalized Approach to the Fluid Dynamics of Particulate Systems - Part 1. General  
Correlation for Fluidization and Sedimentation in Solid Multiparticle Systems - E. BARNEA  
and J. MIZRAHI - IMI Institute for Research and Development, P.O.B. 313, Haifa (Israel)

## APÊNDICE

```

clear all
close all
clc

%% VARIÁVEIS
mod_zonas = dlmread('dados30_100.txt');    %COMANDO QUE LÊ OS DADOS DE
POSIÇÃO IMPRESSOS PELO CÓDIGO SIMS

N = 30;                                     %NÚMERO DE PARTÍCULAS
numero_zonas = 100;                        %NÚMERO DE ZONAS
passo_tempo = 5;                           %PASSO DE TEMPO
phi = 0.01;                                %FRAÇÃO VOLUMÉTRICA
Ra = (N/phi)^(1/3);                        %RAIO DO AGREGADO
realizacoes = 1;                           %NÚMERO DE REALIZAÇÕES

x1=mod_zonas(:,1);                          %VETOR COLUNA COM TODAS AS POSIÇÕES DA
SIMULAÇÃO NO EIXO X
y1=mod_zonas(:,2);                          %VETOR COLUNA COM TODAS AS POSIÇÕES DA
SIMULAÇÃO NO EIXO Y
z1=mod_zonas(:,3);                          %VETOR COLUNA COM TODAS AS POSIÇÕES DA
SIMULAÇÃO NO EIXO Z

%MATRIZ COM TODAS AS DISTÂNCIAS ENTRE AS PARTÍCULAS PARA A 1 ZONA
for j=1:N
for i=1:N
    pos(i,j) = ((x1(i)-x1(j)).^2 + (y1(i)-y1(j)).^2 + (z1(i)-
z1(j)).^2)^(1/2);
end
end

%PEGANDO AS MAIORES DISTÂNCIAS ENTRE AS PARTÍCULAS
Max_valor = max(pos)';
Max_escalar = max(Max_valor)';

%% TODAS AS ZONAS
x=mod_zonas(:,1);    %VETOR COLUNA COM TODAS AS POSIÇÕES DA SIMULAÇÃO NO
EIXO X

```

```

y=mod_zonas(:,2);    %VETOR COLUNA COM TODAS AS POSIÇÕES DA SIMULAÇÃO NO
EIXO Y
z=mod_zonas(:,3);    %VETOR COLUNA COM TODAS AS POSIÇÕES DA SIMULAÇÃO NO
EIXO Z

format bank

%MATRIZ COM TODAS AS DISTÂNCIAS ENTRE AS PARTÍCULAS PARA TODAS AS ZONAS
for j=2:N*numero_zonas/passo_tempo
for i=2:N*numero_zonas/passo_tempo
    pos_n(i,j) = (((x(i)-x(j)).^2 + (y(i)-y(j)).^2 + (z(i)-
z(j)).^2)^(1/2));
    pos_n(1:N,1) = Max_valor;
end
end

%DIÂMETRO DO AGREGADO
Diam_agregado = Max_escalar;

%PEGANDO AS MAIORES DISTÂNCIAS ENTRE AS PARTÍCULAS
Max_valorn = max(pos_n)';
Max_escalarn = max(Max_valorn)';

%MATRIZ DISTÂNCIA ENTRE AS PARTÍCULAS
Matrix = Max_valorn;
Matrix(1:N,1) = Max_valor;

Matrix_hh = reshape(Matrix,N,numero_zonas/passo_tempo);
cond1 = Matrix_hh > Diam_agregado;

%PARTÍCULAS QUE ESTÃO FORA DO AGREGADO
particulas_fora = sum(cond1(:,numero_zonas/passo_tempo));

%% ROTINA QUE INDICA A PARTÍCULA QUE ESTÁ FORA DO AGREGADO

for i=1:N

```

```

        for j=1:numero_zonas/passo_tempo
    if cond1(i,j) == 1
        l(i,1) = Matrix_hh(i,j);           % VETOR QUE CONTEM AS
PARTÍCULAS QUE ESCAPARAM DO AGREGADO
    end
    end
    end

% DETERMINANDO QUAIS PARTÍCULAS ESTÃO DENTRO OU FORA DO AGREGADO
if l(1~=0,1)>1
disp('As seguintes partículas estão fora do agregado')
l(1~=0,1)
elseif size(l(1~=0,1))==1
disp('A partícula seguinte está fora do agregado')
l(1~=0,1)
end

```

## ANEXOS

A figura 9.1, em anexo apresenta de forma esquemática como o código SIMS trabalha.

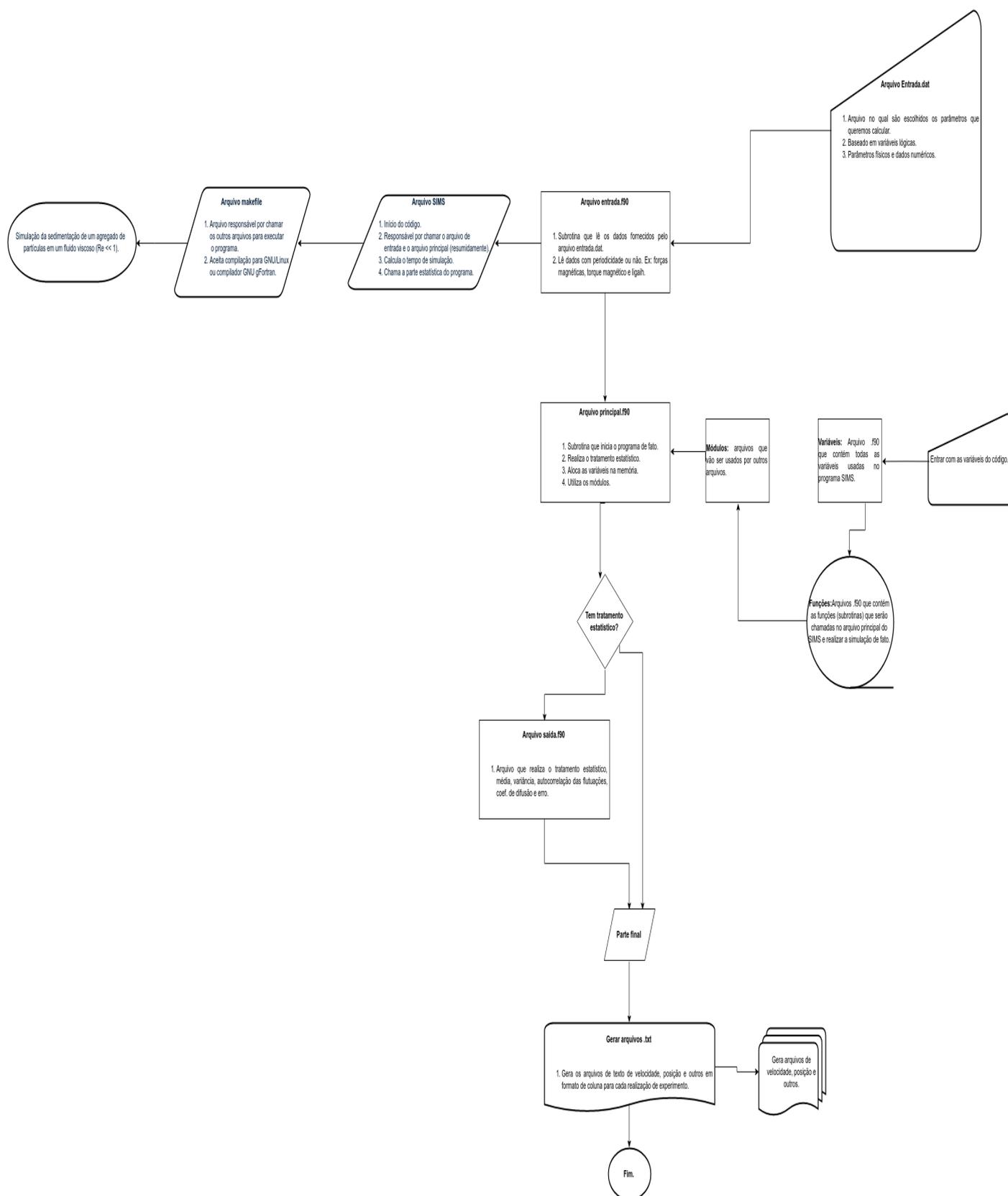


Figura 9.1: Estrutura geral do código SIMS.

A figura 9.2, em anexo ilustram de forma esquemática o funcionamento do arquivo "módulo" referente as funções do código SIMS.

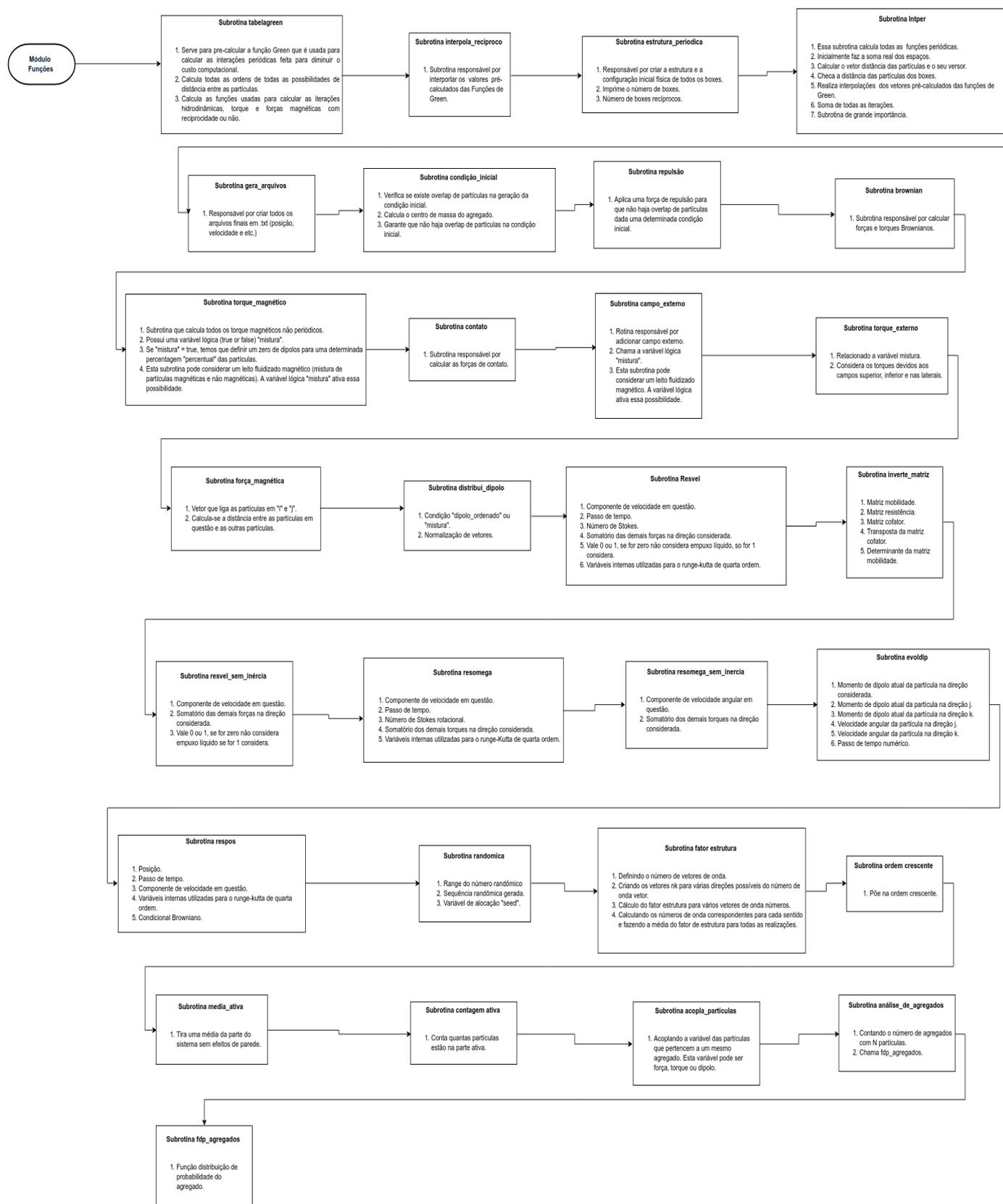


Figura 9.2: Estrutura do módulo funções do código SIMS.