



**ANÁLISE DA DISSIPACÃO DE ENERGIA
EM FERROFLUIDOS SUBMETIDOS À
DIFERENTES TIPOS DE EXCITAÇÃO**

DIOGO GONÇALVES DE SOUZA SALES

**PROJETO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

FACULDADE DE TECNOLOGIA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**ANÁLISE DA DISSIPAÇÃO DE ENERGIA
EM FERROFLUIDOS SUBMETIDOS À
DIFERENTES TIPOS DE EXCITAÇÃO**

DIOGO GONÇALVES DE SOUZA SALES

Orientador: PROF. DR. RAFAEL GABLER GONTIJO, ENM/UNB

PROJETO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**PUBLICAÇÃO ENM.PG - XXX/AAAA
BRASÍLIA-DF, 23 DE SETEMBRO DE 2022.**

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**ANÁLISE DA DISSIPAÇÃO DE ENERGIA
EM FERROFLUIDOS SUBMETIDOS À
DIFERENTES TIPOS DE EXCITAÇÃO**

DIOGO GONÇALVES DE SOUZA SALES

PROJETO DE GRADUAÇÃO ACADÊMICO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA DA FACULDADE DE TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA, COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE BACHAREL EM ENGENHARIA MECÂNICA.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Rafael Gabler Gontijo, ENM/UnB
Orientador

Prof. Dr. Aline Souza de Paula, ENM/UnB
Examinador interno

Prof. Dr. Taygoara Felamingo de Oliveira, ENM/UnB
Examinador interno

BRASÍLIA, 23 DE SETEMBRO DE 2022.

FICHA CATALOGRÁFICA

DIOGO GONÇALVES DE SOUZA SALES

**Análise da dissipação de energia em ferrofluidos submetidos à diferentes tipos de excitação
2022xv, 33p., 201x297 mm**

(ENM/FT/UnB, Bacharel, Engenharia Mecânica, 2022)

Projeto de Graduação - Universidade de Brasília

Faculdade de Tecnologia - Departamento de Engenharia Mecânica

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

DIOGO GONÇALVES DE SOUZA SALES (2022) Análise da dissipação de energia em ferrofluidos submetidos à diferentes tipos de excitação. Projeto de Graduação em Engenharia Mecânica, Publicação xxx/AAAA, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 33p.

CESSÃO DE DIREITOS

AUTOR: Diogo Gonçalves de Souza Sales

TÍTULO: Análise da dissipação de energia em ferrofluidos submetidos à diferentes tipos de excitação.

GRAU: Bacharel ANO: 2022

É concedida à Universidade de Brasília permissão para reproduzir cópias desta projeto de Graduação e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor se reserva a outros direitos de publicação e nenhuma parte desta projeto de Graduação pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Diogo Gonçalves de Souza Sales

Rua 19 Sul, Lote 11, Águas Claras - DF

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à minha família pelo intenso apoio e incentivo durante todos estes anos de graduação. Sou grato à minha mãe pela dedicação e abdicção em favor de exercer, com excelência, uma das funções mais belas e complexas existentes, a maternidade, sendo uma das principais agentes na minha formação moral e acadêmica. Agradeço ao meu pai por ter sido minha primeira referência de comportamento, empenho e caráter e também por estar ao meu lado em todos os momentos desde minha tenra infância. Também agradeço ao meu irmão pela companhia e pelos diversos bons momentos vividos, sua presença torna minha vida mais leve e divertida e me motiva a ser melhor para ser exemplo para você, como meu pai foi para mim. Muito obrigado, família, meu amor por vocês é imensurável.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Rafael Gabler Gontijo, por toda atenção, paciência, comprometimento e cumplicidade durante todos os anos de trabalho à começar do meu primeiro projeto de iniciação científica até a elaboração do presente trabalho. Agradeço também ao Prof. Dr. Andrey Barbosa Guimarães pelo auxílio no entendimento dos problemas de MHT e pelas diversas contribuições nas análises dos resultados desta pesquisa.

Agradeço também aos meus colegas do grupo de pesquisa em fluidos magnéticos estruturado pelo professor Rafael pela ajuda e compartilhamento de ideias. E por fim agradeço à dois grandes amigos, Arthur e Juarez, que tornaram a graduação muito mais divertida e me ajudaram muito em diversos momentos da minha trajetória na engenharia mecânica.

Resumo

Fluidos magnéticos são suspensões coloidais formadas, basicamente, por nanopartículas magnéticas imersas em um solução de base. Este material é relativamente novo e as primeiras evidências de sua criação datam dos anos 60, com a motivação de uso sendo o abastecimento de aeronaves espaciais. Desde então, os fluidos magnéticos tem sido explorado ao redor do mundo em diferentes aplicações que vão deste a arte até o tratamento de tumores. Considerando esta última aplicação, o presente estudo visa compreender o impacto de diferentes tipos de excitação externa na capacidade de dissipação energia no fluido. Assim, serão feitas diversas simulações em um código na linguagem *Fortran* com diferentes padrões de campo magnético externo e alterações nos valores de constantes típicas de problemas em magnetohipertermia (MHT). Em seguida, serão utilizadas bibliotecas em linguagem *Python* para o cálculo da integral HdM que fornece a dissipação de energia dentro de um fluido, com isso, os resultados serão comparados entre si para compreensão da influência do tipo de campo e dos parâmetros típicos de MHT na capacidade de dissipação de energia do material.

Palavras-chaves: magnetohipertermia. campo oscilatório. campo magnético. dissipação.

Abstract

Magnetic fluids are colloidal suspensions composed, basically, of magnetic nanoparticles immersed in a carrier liquid, which can be an oil, for example. This material is relatively new since your creation dates from the 60's due to the motivation of fueling spaceships. Since then, ferrofluids have been explored throughout the world in different applications that may vary from arts to tumours treatment. Considering this last usage, this study aims to comprehend the impact of different types of excitation on the fluid's capacity of dissipating heat. In order to achieve the goals of this study, simulations will be made using a computational code written in *Fortran* with different magnetic field patterns and multiple values of typical constants related to the area of magnetohyperthermia (MHT). Subsequently, *Python* libraries will be used aiming to calculate the integral HdM that represents the energy being dissipated by the fluid, using that, the results will be compared in order to comprehend the influence of the external field and of the typical MHT parameters on the ferrofluid's energy dissipation capacity.

Palavras-chaves: magnetohipertermia. campo oscilatório. campo magnético. dissipação.

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS	I
RESUMO	II
ABSTRACT	III
LISTA DE TERMOS E SIGLAS	IX
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 FLUIDOS MAGNÉTICOS: GENERALIDADES E PROPRIEDADES	1
1.2 FLUIDOS MAGNÉTICOS E A TRANSFERÊNCIA DE CALOR	2
1.3 APLICAÇÕES.....	2
1.4 MAGNETOHIPERTERMIA	3
1.5 EXCITAÇÃO POR BATIMENTO.....	5
1.6 OBJETIVOS.....	6
1.6.1 OBJETIVO GERAL:.....	6
1.6.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS:	6
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	7
2.1 DINÂMICA DE MUITOS CORPOS	7
2.1.1 DINÂMICA DE LANGEVIN	7
2.1.2 FORÇAS E TORQUES MAGNÉTICOS ADIMENSIONAIS	8
2.2 CURVA DE HISTERESE E DISSIPAÇÃO DE ENERGIA	12
2.3 MAGNETOHIPERTERMIA	15
2.3.1 EQUAÇÃO DA ENERGIA EM UM CONTEXTO DE MHT	15
2.3.2 PARÂMETROS ADIMENSIONAIS RELEVANTES	18
3 VALIDAÇÃO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL	19
3.1 SOLUÇÃO ASSINTÓTICA PARA $M_z(t)$	19
3.2 COMPARAÇÃO ENTRE SOLUÇÃO COMPUTACIONAL E ANALÍTICA	20
4 RESULTADOS	22
4.1 FREQUÊNCIA DE EXCITAÇÃO ÚNICA	22
4.1.1 AVALIAÇÃO DA RESPOSTA EM REGIME DILUÍDO ($\phi = 0.05 \lambda = 1$)	22

4.1.2	AVALIAÇÃO DA RESPOSTA EM REGIME CONCENTRADO PARA λ UNITÁRIO ($\phi = 0.15 \lambda = 1$)	27
4.1.3	AVALIAÇÃO DA RESPOSTA EM REGIME CONCENTRADO PARA $\lambda \neq 1$ ($\phi = 0.15 \lambda = 3$)	31
4.2	DUPLA FREQUÊNCIA DE EXCITAÇÃO.....	37
4.2.1	AVALIAÇÃO DA RESPOSTA EM REGIME DILUÍDO ($\phi = 0.05 \lambda = 1$)	37
CONCLUSÃO.....		46
APÊNDICE.....		47
4.2.2	FORMULAÇÃO PARA χ''	49
4.2.3	ANÁLISE DAS ESCALAS DE TEMPO	50
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....		53

LISTA DE FIGURAS

1.1	Representação esquemática de estrutura de um ferrofluido [Klausen 2008]	2
1.2	Obra de arte produzida utilizando um ferrofluido [Kodama 2017]	3
1.3	Representação esquemática da técnica de magnetohipertermia [Lemine 2019].	4
1.4	Representação gráfico do fenômeno de batimento	5
2.1	Representação de uma curva de histerese	12
2.2	Temperatura em função de ϕ . Os círculos preenchidos mostram resultados numéricos. A linha contínua representa a teoria assintótica para $\lambda \neq 0$ e a linha pontilhada representa a teoria assintótica na ausência de interação entre partículas ($\lambda = 0$). Os parâmetros usados foram: $\omega_{dim} = 184k Hz$, $H_0 = 3k Am^{-1}$, $\eta = 0.0012 Pa \cdot s$, $M_d = 446k Am^{-1}$, $a = 5nm$	18
3.1	Partes real e imaginária da susceptibilidade complexa em função do número de Péclet. Parâmetros usados na simulação $\alpha = 1, \lambda = 1, \omega = 1, \phi = 0.1$. Os círculos preenchidos representam os resultados computacionais obtidos utilizando a técnica de soma de Ewald. O resultado obtido por meio da teoria de Berkov é representado pela linha pontilhada.....	21
3.2	Taxa adimensional do aumento da temperatura em função da frequência ω . Círculos preenchidos denotam os resultados obtidos por meio da técnica de soma de Ewald. O resultado obtido por meio da teoria de Berkov é representado pela linha contínua. Parâmetros usados na simulação $\alpha = 1, \lambda = 1, \omega = 1, \phi = 0.1$	21
4.1	Séries temporais para $\omega_1 = 1$	23
4.2	Curvas de histerese sobrepostas.....	24
4.3	Dissipação de energia em termos de Γ e γ em função de ω_1	25
4.4	Campos de temperatura gerados a partir de diferentes frequências na primeira bateria de simulações.....	26
4.5	Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo.....	26
4.6	Séries temporais de M_z para a segunda bateria de simulações	28
4.7	Curvas de histerese para a segunda bateria de simulações	28
4.8	Dissipação de energia em termos de Γ e γ em função de ω_1	29

4.9	Campos de temperatura gerados a partir de diferentes frequências na primeira bateria de simulações.....	30
4.10	Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo.....	30
4.11	Séries temporais de M_z para a terceira bateria de simulações.....	32
4.12	Curvas de histerese para a terceira bateria de simulações.....	32
4.13	Dissipação de energia em termos de Γ e γ em função de ω_1	33
4.14	Campos de temperatura gerados a partir de diferentes frequências na primeira bateria de simulações.....	33
4.15	Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo.....	34
4.16	Comparação entre o valor de γ para os diferentes casos de apenas 1 frequência de excitação.....	35
4.17	Comparação entre os perfis de temperatura para os diferentes casos de campo de 1 frequência.....	35
4.18	Séries temporais de M_z	36
4.19	Curvas de histerese.....	36
4.20	Séries temporais para $\omega_1 = 1$ e $\omega_2 = 1$	38
4.21	Séries temporais de excitação e resposta em função do tempo para 2 frequências externas.....	39
4.22	Curvas de histerese para diferentes frequências de batimento.....	40
4.23	Dissipação de energia em termos de Γ e γ em função de ω_1	41
4.24	Comparação entre o valor de γ para 1 e 2 frequências de excitação, parâmetros usados em ambos os casos: $\phi = 0.05, \alpha = 1, Pe = 1, \lambda = 1$. A curva em preto representa o caso de frequência de excitação única e a curva vermelha mostra o caso em que duas frequências são utilizadas.....	42
4.25	Variação da temperatura no centro do tumor em função da frequência variável.....	42
4.26	Campo de temperatura no caso de duas frequências externas iguais.....	42
4.27	Campos de temperatura gerados a partir de diferentes frequências.....	43
4.28	Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo.....	43
4.29	Campos de temperatura, comparação entre frequência única e dupla ($\omega_1 = 366.7kHz$ $\phi = 0.05$ $\lambda = 1$).....	44
4.30	Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo, comparação entre frequência única e dupla.....	45
4.31	Partícula magnética envolvida por uma camada de surfactante.....	51

LISTA DE TABELAS

2.1	Parâmetros típicos de <i>MHT</i> dimensionais constantes para todas as simulação..	17
4.1	Conversão entre ω_1 adimensional e dimensional	25

Lista de termos e siglas

MRI Magnetic Resonance imaging

MPI Magnetic Particle imaging

MHT Magnetohipertermia

FFT Fourier Fast Transform

Capítulo 1

Introdução

1.1 Fluidos magnéticos: generalidades e propriedades

Fluidos magnéticos são suspensões coloidais constituídas de nanopartículas magnéticas imersas em um fluido base, geralmente um óleo [Guimarães et al. 2020]. A figura 1.1 representa a constituição de um fluido magnético, ilustrando a distribuição das nanopartículas no fluido base. A criação deste material data da década de 60 com a motivação inicial de converter calor em trabalho sem o uso de componentes mecânicos [Rosensweig 2013]. Este intuito inicial não foi completamente atendido, entretanto, a criação de um novo tipo de fluido criou novas possibilidades para o desenvolvimento de novas tecnologias.

A presença de nanopartículas magnéticas no fluido base torna o fluido responsivo à presença de campos magnéticos, o que torna o material interessante do ponto de vista físico, uma vez que existirão dois mecanismos principais atuando no movimento das nanopartículas e, por consequência, na resposta final do ferrofluido à estímulos externos. A excitação externa resultante do campo aplicado exerce um torque magnético nos dipolos que balanceiam o torque browniano atuando nas partículas em decorrência das suas colisões com a molécula do fluido base [Guimarães et al. 2020], este torque tende a favorecer o alinhamento das partículas na direção do campo aplicado.

Uma vez que a excitação um fluido magnético se dá pela interação de longo alcance entre campo e dipolo [Guimarães et al. 2020], é possível controlar o tipo de resposta obtida pelo fluido por meio da alteração de algumas características do campo magnético usado ou até mesmo do próprio fluido. Parâmetros como a fração volumétrica das partículas magnéticas, frequência do campo aplicado e tipo de campo aplicado (rotativo ou oscilatório) podem alterar significativamente a resposta final do material.

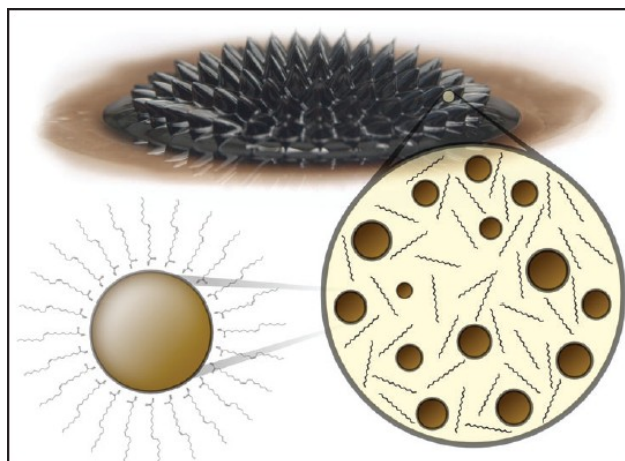


Figura 1.1: Representação esquemática de estrutura de um ferrofluido [Klausen 2008]

1.2 Fluidos magnéticos e a transferência de calor

A aplicação de um campo magnético externo em um fluido magnético altera características do material a nível de partícula, tais alterações mudam o movimento das nanopartículas que compõem o fluido, portanto, refletem nas propriedades médias do ferrofluido como: viscosidade e temperatura [Nussenzveig 2018] [Zubarev et al. 2005].

De tal forma, a excitação magnética de um campo externo tem grande papel na intensificação dos efeitos de transferência de calor no material [Wang et al. 2019]. A formação de aglomerados de partículas dentro do fluido provoca uma distribuição não uniforme de densidade, favorecendo a existência de um fluxo convectivo na região que, obviamente, terá efeitos consideráveis na capacidade de transferência de calor do fluido. Tais efeitos podem ser aproveitados para aplicações típicas de engenharia como o uso de ferrofluido em veículos automotores como líquido de arrefecimento ou óleo de câmbio [Kole and Dey 2010], [Kole and Dey 2011].

1.3 Aplicações

Em decorrência de sua grande versatilidade e da possibilidade de alteração de propriedades físicas sem contato com o material, os fluidos magnéticos podem ser usados em diversos setores.

Nos elementos de máquinas, ferrofluidos podem ser utilizados como amortecedores em diversos contextos. Uma situação comum para este uso é a aplicação em alto falantes, pois a utilização de fluidos magnéticos nestes equipamentos acarreta em um aumento de sua performance [Bottenberg et al. 1980]. Neste caso, além de ajudar a dissipar o calor excessivo

nas bobinas do equipamento, o fluido magnético ajuda a suavizar ressonâncias que poderiam produzir um ruído desagradável [Kole and Khandekar 2021].

Dentro da engenharia térmica, os ferrofluidos têm um papel relevante como condutores térmicos. Diversos autores mostram que a condutividade térmica de fluidos magnéticos é uma propriedade muito influenciada pelos campos externos que excitam o material. Diante disso, são materiais que encontram ampla aplicação em qualquer situação na qual se deseja uma condutividade térmica que possa ser controlada [Kole and Khandekar 2021], [Wust et al. 2002], [Philip et al. 2007] e [Philip et al. 2008].

No campo da biomedicina, além da aplicação de magnetohipertermia que será discutida em maior detalhe na próxima seção, existe ainda a possibilidade de utilização dos ferrofluidos como agentes de contraste em exames. Diferentes técnicas para diagnósticos de doenças utilizam os ferrofluidos como material base como a *Magnetic Resonance imaging (MRI)* e a *Magnetic Particle imaging (MPI)* [Kole and Khandekar 2021].

Em virtude da capacidade do ferrofluido de assumir diferentes formas que podem ser controladas pela excitação externa, até mesmo o ramo artístico tem explorado a produção de obras por meio de sua manipulação. A figura 1.2 mostra uma dessas produções que faz uso deste material.



Figura 1.2: Obra de arte produzida utilizando um ferrofluido [Kodama 2017]

1.4 Magnetohipertermia

Além das aplicações supracitadas, um dos usos relevantes de um ferrofluido é a técnica de magnetohipertermia. Na medicina moderna, a termoterapia já é utilizada como uma possibilidade no tratamento de tumores, esta alternativa consiste em, basicamente, aumentar a temperatura da região tumoral até um certo intervalo (43° - 47°) provocando a morte das

células cancerígenas [Silva et al. 2012]. Sendo assim, uma das possibilidades para a termoterapia em tratamento de tumores é a magnetohipertermia que consiste na utilização de ferrofluidos como uma forma de proporcionar este aumento de temperatura, pois, como dito anteriormente, é possível controlar as propriedades médias deste material sem o seu manuseio direto, fazendo uso apenas da aplicação de campos magnéticos alternados para elevar a temperatura da região.[Silva et al. 2012].

Geralmente, nesta aplicação, o ferrofluido é injetado na região tumoral e excitado por um campo externo aplicado (mais comumente rotativo ou oscilatório). A partir disto, é possível gerar uma resposta térmica na região que levará à morte do tecido doente e, se a técnica for bem aplicada, ocorrerá preservação do tecido saudável circundante. Uma representação esquemática do tratamento de magnetohipertermia pode ser encontrada na figura 1.3.

A técnica de magnetohipertermia vem apresentando resultados promissores e estudos mostram que os fatores mais relevantes para o sucesso do tratamento utilizando o método são: a intensidade do campo aplicado e o tempo de exposição do tumor a este campo [Silva et al. 2012], [Guedes et al. 2004] e [Wust et al. 2002].

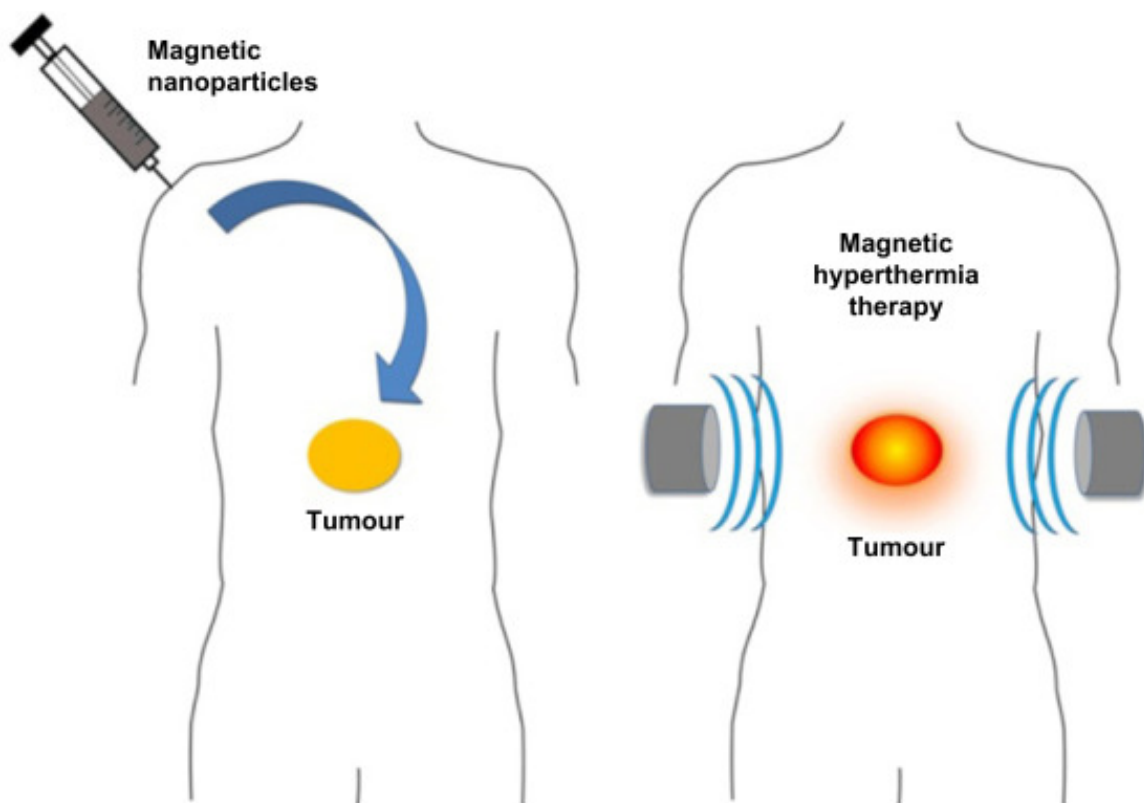


Figura 1.3: Representação esquemática da técnica de magnetohipertermia [Lemine 2019]

1.5 Excitação por batimento

O fenômeno de batimento é um fenômeno ondulatório devido à superposição de duas ondas de mesma amplitude porém frequências ligeiramente diferentes, de modo a produzir uma onda resultante de amplitude variável, devido a alternância entre momentos de interferência construtiva e destrutiva, e com frequência e período característicos [Nussenzeig 2018]. A figura 1.4 mostra duas ondas diferentes que sofrem o fenômeno de batimento. Na figura 1.4(c), é possível verificar, as duas ondas superpostas e assim ver com mais clareza a alternância entre as interferências construtivas e destrutivas. A figura 1.4(d) mostra a função $H(t)$, resultante da soma das duas funções $F(t)$ e $G(t)$ que possuem frequências ligeiramente diferentes.

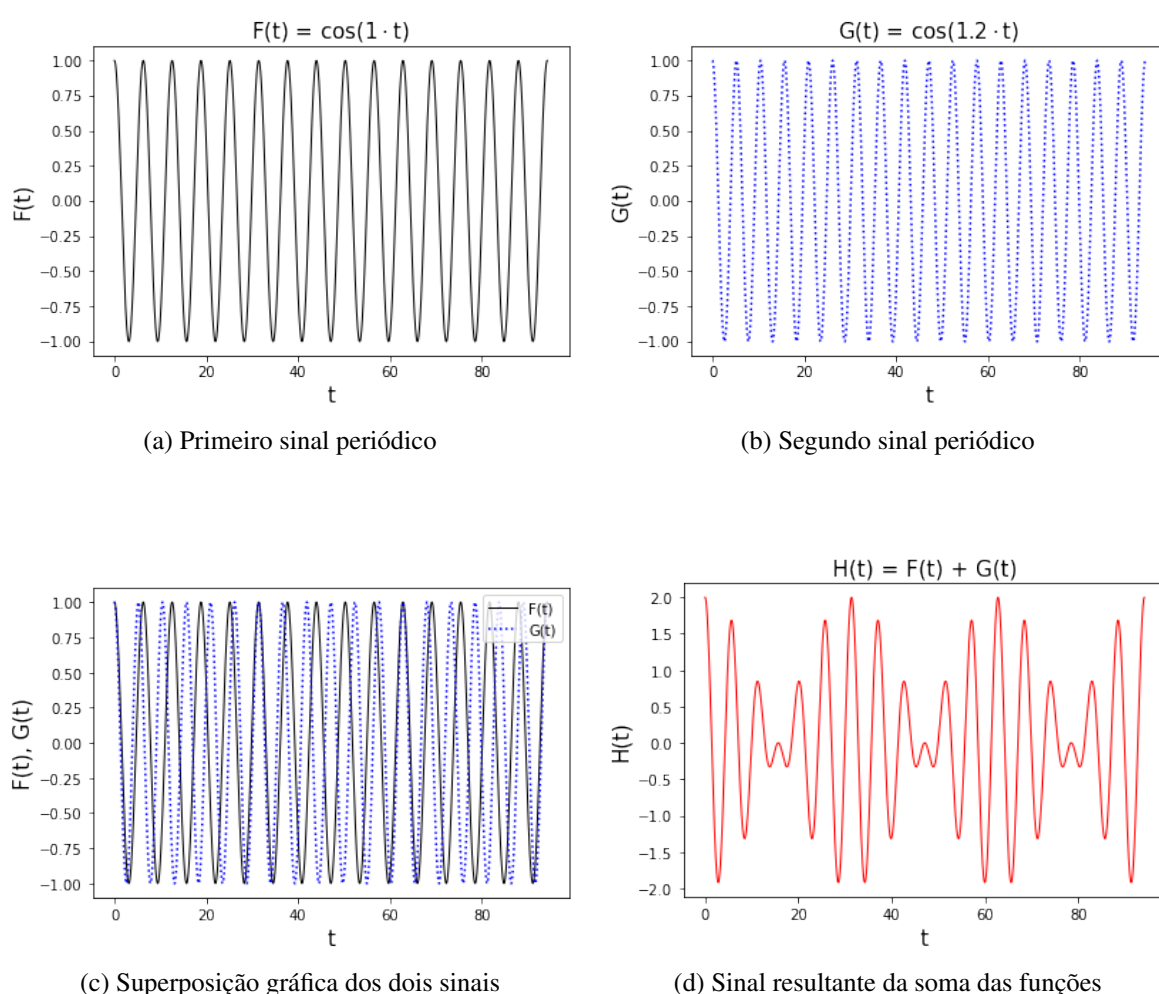


Figura 1.4: Representação gráfico do fenômeno de batimento

Uma vez que a intensidade e o padrão da excitação do campo magnético aplicado são critérios extremamente relevantes na resposta térmica do ferrofluido [Guimarães et al. 2020] [Silva et al. 2012], é interessante explorar esta forma de excitação externa para investigar as possíveis respostas no material e na região tumoral, a fim de propor novas alternativas para os rumos da magnetohipertermia.

1.6 Objetivos

1.6.1 Objetivo Geral:

Diante do exposto, o objetivo do presente trabalho é investigar os comportamentos obtidos em um contexto de magnetohipertermia quando o ferrofluido é excitado por diferentes campos que produzem batimentos e compará-los com casos onde a excitação externa é feita por um único campo do tipo oscilatório. Além disso, deseja-se também compreender como alguns parâmetros típicos do problema de magnetohipertermia alteram a dissipação de energia no sistema. A investigação será feita por meio do tratamento dos dados produzidos por um código computacional em linguagem *Fortran*, capaz de reproduzir toda a física envolvida na formulação do problema.

1.6.2 Objetivos Específicos:

- Determinar o equacionamento adequado para quantificar a dissipação de energia em um ferrofluido para um caso geral;
- Estudar o comportamento desta dissipação de energia em um caso com mais de uma frequência de excitação;
- Estudar, para ambos os casos (frequência única e dupla), o impacto da mudança dos parâmetros típicos existentes em MHT (λ, ϕ)

Capítulo 2

Fundamentação teórica

2.1 Dinâmica de muitos corpos

2.1.1 Dinâmica de Langevin

A física dos problemas envolvendo ferrofluidos é formada, basicamente, por duas dinâmicas principais: o movimento browniano e a resposta do fluido à excitação do campo externo. O movimento browniano se dá em virtude das colisões das nanopartículas do fluido magnético com as moléculas do fluido base, de tal sorte que o movimento resultante possui caráter aleatório. Assim, a trajetória das partículas bem como as forças e torques envolvidos no problema possuirão o mesmo tipo de comportamento. Portanto, o método da Dinâmica de Langevin, que preconiza a resolução diferenciais estocásticas, foi utilizado para determinar as forças e torques que irão determinar a dinâmica translacional e rotacional do problema. [Berkov and Gorn 2001], [Gontijo and Cunha 2015a] e [Gontijo and Cunha 2017a].

Tais forças e torques foram computados utilizando a técnica de soma de Ewald, que computa uma parcela das equações em um espaço de Fourier para acelerar a convergência das soluções, com este método, é possível chegar a uma solução consideravelmente mais precisa para condições de contorno periódicas e também superar problemas relacionados à convergência da solução relacionados com o decaimento lento de interações de longo alcance entre as partículas.[Guimaraes et al. 2020, Gontijo and Cunha 2015b, Gontijo and Cunha 2017b, Rosa et al. 2017, Ewald 1921, Beenakker 2005] Outra técnica também incorporada no presente estudo é o Método da Mínima Imagem, que calcula as interações dos dipolos magnéticos sem a contribuição da periodicidade das imagens das partículas, tal método é capaz de oferecer resultados com boa eficácia para regimes mais diluídos. [Rosa et al. 2017]

2.1.2 Forças e torques magnéticos adimensionais

É possível calcular as forças magnéticas resultantes da interação entre partículas em termos de um potencial magnético dado por [Ilg and Odenbach 2009]. Os índices i e j representam duas partículas diferentes, portanto, a grandeza ψ_{ij} denota o potencial magnético existente entre duas partículas distintas

$$\psi_{ij} = \sum_{j \neq i} \frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} [\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j - 3(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})], \quad (2.1)$$

e

$$\psi_i = -\mu_0 m_i H(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}), \quad (2.2)$$

onde $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$ (ou N/A^2) representa a permeabilidade magnética do meio e m_i e m_j são as magnitudes dos momentos de dipolo magnético das partículas i e j com direções \mathbf{d}_i e \mathbf{d}_j , respectivamente. O vetor $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ é um vetor paralelo à linha que une os centros dos dois dipolos m_i e m_j , onde r_{ij} é a distância entre os seus centros, H é a intensidade do campo magnético externo aplicado às partículas alinhado na direção $\hat{\mathbf{h}}$. As equações 2.1 e 2.2 são responsáveis por computar os potenciais de interação, a primeira calcula as interações entre partículas e a segunda quantifica as interações entre os dipolos e o campo externo aplicado.

Assim, a força magnética total atuando em cada partícula que constitui a suspensão é dada por

$$\mathbf{f}_m^i = -(\nabla \psi_{ij} + \nabla \psi_i), \quad (2.3)$$

Ao considerar um campo externo homogêneo, de forma que $\nabla(H\hat{\mathbf{h}}) = \mathbf{0}$, é possível chegar a

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_m^i &= \sum_{j \neq i} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j)\hat{\mathbf{r}}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\mathbf{d}_j \\ &+ (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\mathbf{d}_i - 5(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij}]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Com a intenção de reescrever as equações governantes do problema de forma adimensional, o raio a da partícula foi usado como uma escala típica de comprimento do problema e a velocidade de Stokes U_s de uma partícula única sedimentando em um "creeping flow" foi considerada como a escala típica de velocidade. De tal sorte,

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U_s}, \quad \mathbf{r}^* = \frac{r}{a} \quad \text{e} \quad t^* = \frac{tU_s}{a}, \quad (2.5)$$

onde, o asterisco indica a forma adimensional das grandezas calculadas. De agora em diante, os asteriscos serão removidos da notação por motivos de simplificação. As forças magnéticas

entre dipolos em forma adimensional são dadas por

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_m^i &= \frac{24\lambda}{Pe} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_i \\ &\quad - 5(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij}], \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde λ é um parâmetro físico relevante no contexto da dinâmica de Langevin aplicada aos fluidos magnéticos. Este parâmetro representa uma medida de força das interações magnética entre os dipolos e pode ser considerado uma razão entre as forças dipolares de origem magnética e browniana. Neste trabalho, o parâmetro λ é definido por:

$$\lambda = \frac{\mu_0 m^2}{32\pi k_B \theta_0 a^3}, \quad (2.7)$$

onde a força do dipolo $m = (4\pi M_s a^3)/(3\phi)$. Aqui, M_s representa a magnetização de saturação que foi a grandeza utilizada para adimensionalizar a magnetização no código computacional usado nas simulações. Outro parâmetro importante que surge à essa altura do equacionamento é o número de Péclet (que aparece na equação 2.6), dado por $Pe = U_s a / \mathcal{D}_0$, que pode ser definido como uma razão entre duas escalas de tempo: a escala de tempo de difusão browniana a^2 / \mathcal{D}_0 e uma escala de tempo de convecção. O termo $\mathcal{D}_0 = k_B \theta_0 / (6\pi\eta a)$ corresponde à difusividade de Stokes-Einstein [McQuarrie 2000]. Aqui θ_0 é uma temperatura absoluta de referência e k_B é a constante de Boltzmann. Por hora, a temperatura θ_0 será considerada como a própria temperatura inicial do tumor, adotada como 36, 5°C. No contexto estudado no presente trabalho, a escala de tempo convectiva apropriada é a/U_s , onde U_s é a velocidade de Stokes de uma única partícula. Portanto, o número de Péclet pode ser reescrito como:

$$Pe = \frac{6\pi\eta a^2 U_s}{k_B T}. \quad (2.8)$$

Adotando U_s/a como uma escala típica de frequência de rotação, é possível escrever a expressão para o torque magnético dipolar induzido por ser escrita como

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_m^i &= \frac{24\pi\lambda}{Pe} \left[- \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathcal{T}_1(r) + \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}, \mathbf{k} \neq 0} \mathcal{T}_2(k) \right] \\ &\quad + \frac{3\alpha}{4Pe} (\mathbf{d}_i \times \hat{\mathbf{h}}), \end{aligned} \quad (2.9)$$

Onde o parâmetro α é outro parâmetro físico de grande interesse para o problema e representa, fisicamente, uma relação entre as contribuições da energia magnética associado ao campo externo aplicado e a energia cinética das partículas devido ao movimento Browniano,

dada por:

$$\alpha = \frac{\mu_0 m H_0}{k_B \theta_0}. \quad (2.10)$$

Aqui $\xi = \pi^{1/2} V^{-1/3}$ representa um parâmetro de convergência oriundo da técnica de soma de Ewald. As funções $\mathcal{T}_1(r)$ e $\mathcal{T}_2(k)$ no espaço físico e no espaço de Fourier são dadas respectivamente por

$$\mathcal{T}_1(r) = (\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j) \mathcal{B}(r) - (\mathbf{d}_i \times \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathcal{C}(r), \quad (2.11)$$

e

$$\mathcal{T}_2(k) = 4\pi(\mathbf{d}_i \times \hat{\mathbf{k}})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{k}}) e^{-\left(\frac{\pi k}{L\xi}\right)^2} \cos(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}), \quad (2.12)$$

onde $\mathcal{B}(r)$ e $\mathcal{C}(r)$ são funções de ξ .

É interessante notar que a razão α/Pe mostrada na equação 2.9 pode ser interpretada como um número de Reynolds magnético que relaciona a importância entre as forças magnéticas e viscosa. Entretanto, a formulação adotada no presente estudo foi a de analisar os parâmetro α e Pe , porque, ao modelar o escoamento de uma perspectiva do contínuo, os dois parâmetros separadamente apresentam uma influência significativa na equação da magnetização.

É possível modelar o tensor correlação Browniano considerando o time de autocorrelação considerando as forças e torques em dois tempo diferentes, distantes de $(t - t')$ como

$$\langle \mathbf{f}_b^i(t) \cdot \mathbf{f}_b^i(t') \rangle = (6\pi\eta a)(6k_B T) \delta(t - t'), \quad (2.13)$$

e

$$\langle \mathbf{T}_b^i(t) \cdot \mathbf{T}_b^i(t') \rangle = (8\pi\eta a^3)(6k_B T) \delta(t - t'), \quad (2.14)$$

onde $\delta(t - t')$ é a função de distribuição de Dirac. Nestas condições, as forças e torque brownianos estocásticos foram modelados neste trabalho como:

$$\mathbf{f}_b^i = \left[6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}_0}{\delta\tau} \right)^{1/2} \right] \boldsymbol{\xi} \quad (2.15)$$

e

$$\mathbf{T}_b^i = \left[8\pi\eta a^3 \left(\frac{6\mathcal{D}_r}{\delta\tau} \right)^{1/2} \right] \boldsymbol{\xi}. \quad (2.16)$$

Aqui, $\delta\tau$ é um passo de tempo relacionado à flutuação térmica Browniana. A quantidade $\boldsymbol{\xi}$ está associada à modelagem de forças e torques Brownianos e representa um vetor randômico unitário com uma distribuição uniforme no intervalo $[-1, 1]$ dado por

$$\boldsymbol{\xi} = |\xi|^{-1} (\xi_x \hat{e}_x + \xi_y \hat{e}_y + \xi_z \hat{e}_z). \quad (2.17)$$

Portanto, a expressão adimensional para as forças e torques brownianos são fornecidas, respectivamente, por

$$\mathbf{f}_b^i = \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{T}_b^i = \left(\frac{8}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}. \quad (2.18)$$

Então, as expressões adimensionais para as forças não hidrodinâmicas \mathbf{f}_r^i representam forças repulsivas de curto alcance atuando na partícula i devido à proximidade com a partícula j e \mathbf{f}_c^i representa as forças de contato atuando na partícula i devido as colisões com a partícula j são dadas, respectivamente, por:

$$\mathbf{f}_c^i = P_c \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad \mathbf{f}_r^i = c_1 |\mathbf{u}_i| e^{\left(-\frac{\epsilon_{ij}}{c_2}\right)} \hat{\mathbf{e}}_r. \quad (2.19)$$

Agora, as versões adimensionais das Eqs. (2.22) e (2.23) que descrevem o movimento de uma partícula i em suspensão são dadas por

$$St \frac{d\mathbf{u}^i}{dt} = -\mathbf{u}^i + \hat{\mathbf{g}} + \mathbf{f}_b^i + \mathbf{f}_m^i + \mathbf{f}_r^i + \mathbf{f}_c^i \quad (2.20)$$

e

$$St_r \frac{d\boldsymbol{\omega}^i}{dt} = -\boldsymbol{\omega}^i + \mathbf{T}_b^i + \mathbf{T}_m^i, \quad (2.21)$$

onde $\hat{\mathbf{g}} = (\Delta\rho g 4/3\pi a^3)/(6\pi\eta a U_s)$ é a força de empuxo adimensional devido ao efeito líquido da gravidade na partícula i . E também, $St = M^i U_s / 6\pi\eta a^3$ é o número de Stokes relacionado à inércia da partícula, que representa a razão entre o tempo de relaxação da partícula e a escala de tempo convectiva da partícula e $St_r = J^i U_s / 8\pi\eta a^4$ é o equivalente número de Stokes rotacional.

Assim, as equações dimensionais que governam os movimentos rotacionais e translacionais de uma partícula de índice i dentro de uma suspensão monodispersa de N partículas são dadas por

$$M^i \frac{d\mathbf{u}^i}{dt} = -6\pi\eta a \mathbf{u}^i + \Delta\rho g \frac{4}{3}\pi a^3 + \mathbf{f}_b^i + \mathbf{f}_m^i + \mathbf{f}_r^i + \mathbf{f}_c^i \quad (2.22)$$

e

$$J^i \frac{d\boldsymbol{\omega}^i}{dt} = -8\pi\eta a^3 \boldsymbol{\omega}^i + \mathbf{T}_b^i + \mathbf{T}_m^i, \quad (2.23)$$

que são basicamente a segunda lei de Newton escrita para o movimento translacional e rotacional, respectivamente. Nestas expressões M^i é a massa de uma partícula arbitrária i , \mathbf{u}^i denota a velocidade de uma partícula, t é o tempo, \mathbf{g} denota o vetor de aceleração gravitacional, J^i é o momento de inércia de cada partícula, $\boldsymbol{\omega}^i$ é a velocidade angular de cada partícula. Aqui, as forças \mathbf{f}_b^i , \mathbf{f}_m^i , \mathbf{f}_r^i , \mathbf{f}_c^i são as forças de natureza não hidrodinâmica e torques atuantes em cada partícula. As forças são, respectivamente, forças brownianas, mag-

néticas, repulsivas e forças de contato. Os torques T_b^i e T_m^i correspondem aos torques de origem browniana e magnética respectivamente.

2.2 Curva de histerese e dissipação de energia

A curva de histerese de um material magnético relaciona duas grandezas fundamentais no problema de magnetohipertermia, a magnetização do material (M) e a intensidade do campo aplicado (H). Tal curva mostra a intensidade de campo (H) necessária para desmagnetizar o material e o quanto de magnetização (M) resta no sistema na ausência de campo aplicado [Rosensweig 2013].

Em um ciclo histerético como o mostrado na figura 2.1, a área sob a curva mostra o trabalho líquido obtido em um ciclo de histerese. Considerando um processo adiabático ($\delta Q = 0$) e aplicando a primeira lei da termodinâmica expressa na equação 2.24, onde $\delta W = \mathbf{H} \cdot d\mathbf{B}$ [Stratton 1941].

$$dU = \delta Q + \delta W \quad (2.24)$$

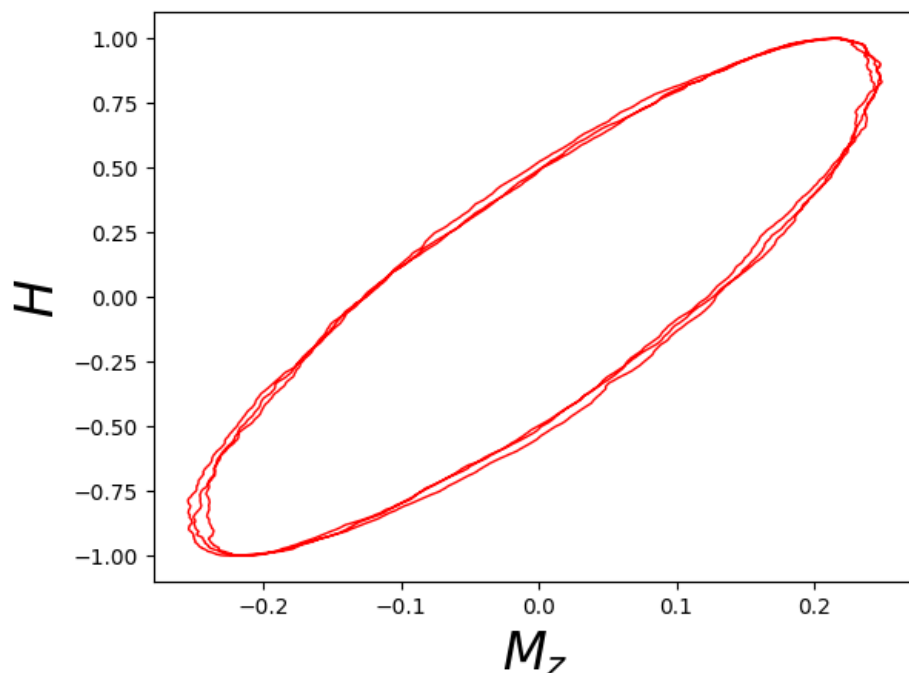


Figura 2.1: Representação de uma curva de histerese

A fim de compreender a física do problema de forma completa, é necessário conhecer o perfil da resposta magnética do ferrofluido em decorrência da aplicação de um campo externo. Para atingir este objetivo, consideremos um conjunto de partículas magnéticas imersas

em um fluido base que é excitado por um campo externo do tipo oscilatório. Imaginemos ainda que as partículas estão contidas em um sistema isolado, de modo que a equação 2.25 é válida, uma vez que $\delta Q = 0$.

$$du = -\delta W = -(-\mathbf{H} \cdot d\mathbf{B}) \quad (2.25)$$

Mas,

$$d\mathbf{B} = \mu_0 (d\mathbf{H} + d\mathbf{M}) \quad (2.26)$$

E também é possível escrever:

$$du = \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{H} + \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} \quad (2.27)$$

Analisando um ciclo, segue que:

$$\oint_c du = \oint_c \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{H} + \oint_c \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} \quad (2.28)$$

$$\mathbf{H} \cdot d\mathbf{H} = d\left(\frac{H^2}{2}\right) \quad (2.29)$$

$$\oint_c d\left(\frac{H^2}{2}\right) = 0 \quad (2.30)$$

Assim, em um ciclo de campo:

$$du = \oint_c \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} \quad (2.31)$$

Para simplificar a notação, a seguinte representação para esta integral será adotada:

$$\oint_c \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} = \Gamma \quad (2.32)$$

E sua média temporal será denotada por:

$$\frac{\oint_c \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M}}{t} = \gamma \quad (2.33)$$

Como o presente trabalho propõe analisar casos onde é possível existir não linearidades na resposta do ferrofluido à uma excitação externa, como em altos regimes de concentração com mais de uma frequência de campo. A expressão para avaliar a dissipação de energia deve ser a mais genérica possível, ou seja, aquela que não precisa de pressupostos para que seja aplicável. Sendo assim, durante todo este trabalho, a dissipação energética nos

ciclos será avaliada conforme as equações 2.32 e 2.33. No entanto, em casos mais simples, onde é possível assumir uma defasagem constante entre campo e magnetização, existe uma abordagem alternativa que pode ser aplicada, ela será mencionada na seção de apêndice em virtude de não ser utilizada neste trabalho.

2.3 Magnetohipertermia

2.3.1 Equação da energia em um contexto de MHT

Para ter um entendimento completo da física existente em um problema de MHT, é necessário relacionar a microestrutura de um ferrofluido e seu comportamento com a temperatura da região afetada por este fluido, no caso do presente estudo, uma região tumoral. Para compreender esta relação, é fundamental encontrar uma expressão matemática que mostre a alteração da energia em um meio biológico sujeito a indução magnética de calor por meio de MHT. O balanço completo de energia por unidade de volume em uma região contínua, estacionária e esférica de material biológico de raio ℓ_e , composta por nanopartículas magnética de raio a , densidade ρ_s , calor específico c_s e de um ambiente líquido de densidade ρ_0 e calor específico c_0 é mostrado na expressão 2.34 [Gontijo and Guimarães].

$$\rho_e c_e \frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot (k_e \nabla \theta) + \dot{P}_m + \rho_b c_b \omega_b (\theta_b - \theta) + \dot{q}_m \quad (2.34)$$

Na equação acima ρ_e e c_e representam, respectivamente, densidade e calor específico do ferrofluido contendo as partículas magnéticas. O parâmetro k_e é a condutividade térmica efetiva, θ é a temperatura local. O parâmetro ρ_b e c_b correspondem, respectivamente, à densidade e calor específico do sangue. θ_b é a temperatura do sangue arterial, ω_b é a taxa de perfusão sanguínea e \dot{q}_m corresponde à produção metabólica de energia do tecido vivo. O termo \dot{P}_m é o termo associado ao trabalho de desmagnetização e, matematicamente, será modelado neste trabalho da forma mostrada na equação 2.35.

$$\dot{P}_m = \frac{\mu_0 \int H dM}{t_{sim}} \quad (2.35)$$

Onde t_{sim} é o tempo de simulação total dimensional, em segundos. Conhecendo todos os termos da equação 2.35, se torna possível o cálculo da evolução temporal do campo de temperatura no tumor analisado. Sendo assim, é exatamente esta expressão que é responsável pela integração dos fenômenos em escala microscópica e que alteram o valor de integral $\int H dM$ e o fenômeno em escala macroscópica que é o aquecimento de uma região tumoral.

É importante entender que na equação 2.35, os valores de campo H e resposta M devem estar em sua forma dimensional, a fim de obter-se uma resposta de campo de temperatura significativa para a compreensão física do problema. Então, retomando os passos utilizados para converter estas grandezas de uma escala adimensional para uma escala dimensional, são usadas as seguintes expressões:

$$\mathbf{H}_{\text{dim}} = H \cdot H_0 \quad (2.36)$$

$$\mathbf{M}_{\text{dim}} = M \cdot M_s \quad (2.37)$$

Sendo que:

$$M_s = \phi \cdot M_d \quad (2.38)$$

$$H_0 = \frac{\alpha \cdot K_B \cdot T_0}{\mu_0 \cdot m} \quad (2.39)$$

Aqui, α é uma constante típica de magnetohipertermia já discutida anteriormente, K_B é a constante de *Stefan–Boltzmann* que tem valor de $1.380649 \cdot 10^{-23} \text{W/m}^2 \cdot \text{K}^4$, T_0 é uma temperatura de referência e neste estudo foi considerada como sendo equivalente a 313.15°K , μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo e é dada por $4\pi \cdot 10^{-7} \text{H/m}$. Tem-se ainda que m é o momento de dipolo e é calculado como $m = V_p \cdot M_d$. Aqui, V_p é o volume da partícula e M_d é intensidade de campo magnético. As duas grandezas podem ser expressas por:

$$V_p = \left(\frac{4\pi}{3} \right) \cdot a^3 \quad (2.40)$$

$$M_d = 446000 \text{A/m} \quad (2.41)$$

O valor de M_d é adotado com base na magnetita, um material magnético comum em aplicações de magnetohipertermia. Na equação 2.40, a representa o volume da partícula de ferrofluido, para a resolução da equação 2.35 em todos os casos neste trabalho, o seu valor é de $a = 5 \cdot 10^{-9} \text{m}$.

Além de M e H , também é relevante conhecer o tempo e a frequência de campo aplicado em suas formas dimensionais, justamente para maior contextualização dos resultados e verificação da coerência da suas ordens de grandeza. Os valores dimensionais de frequência ω_{dim} e tempo t_{dim} são definidos pelas seguintes expressões:

$$\omega_{\text{dim}} = \omega \cdot \left(\frac{D}{a^2} \right) \quad (2.42)$$

$$t_{\text{dim}} = t \cdot \left(\frac{a^2}{D} \right) \quad (2.43)$$

Onde D é o coeficiente de difusão de *Stokes-Einstein* e pode ser calculado pela expressão 2.44.

$$D = \frac{K_B \cdot T_0}{6\pi \cdot \eta \cdot a} \quad (2.44)$$

Aqui, η é a viscosidade do ferrofluido analisado e será considerada igual a $5 \cdot 10^{-3} \text{pa} \cdot \text{s}$ em todas as soluções de campo de temperatura mostradas neste trabalho.

Para facilitar a visualização dos parâmetros típicos de *MHT* que serão constantes em todas as simulações e influenciam no cálculo do termo \dot{P}_m , a tabela 2.1 foi construída.

H_0	η	M_d	a
14.7kAm^{-1}	$0.005 \text{pa} \cdot \text{s}$	446kAm^{-1}	5nm

Tabela 2.1: Parâmetros típicos de *MHT* dimensionais constantes para todas as simulação

É interessante citar que a abordagem adotada nesta seção já foi utilizada previamente por R.G. Gontijo e A.B. Guimarães [Gontijo and Guimarães 2023] em trabalho publicado recentemente e demonstrou boa convergência com resultados experimentais já registrados na literatura atual. A figura 2.2, retirada do artigo mencionado previamente [Gontijo and Guimarães 2023], mostra os resultados numéricos obtidos em comparação aos resultados obtidos pela teoria contínua considerando ou não as interações entre partículas. O ponto destacado em vermelho mostra o resultado que foi obtido no trabalho de [Salloum et al. 2008], que estudou o efeito do aumento de temperatura em tecido animal durante a aplicação da técnica de magnetohipertermia. Neste trabalho, uma temperatura em torno de 41°C foi atingida, pela imagem 2.2, é possível ver que todos os 3 resultados obtidos foram muito próximos daquele encontrado por M.Salloum, principalmente o resultado numérico. É importante destacar que esta seria uma temperatura muito adequada em um contexto de tratamento de tumores, pois seria capaz de neutralizar células cancerígenas e manter o tecido saudável preservado. Porém, como o intuito deste trabalho é investigar de forma mais completa as possibilidades de aquecimento de um ferrofluido, sendo assim, as temperaturas aqui exploradas não se limitarão àquelas recomendadas para um tratamento de células tumorais com preservação do tecido saudável circundante.

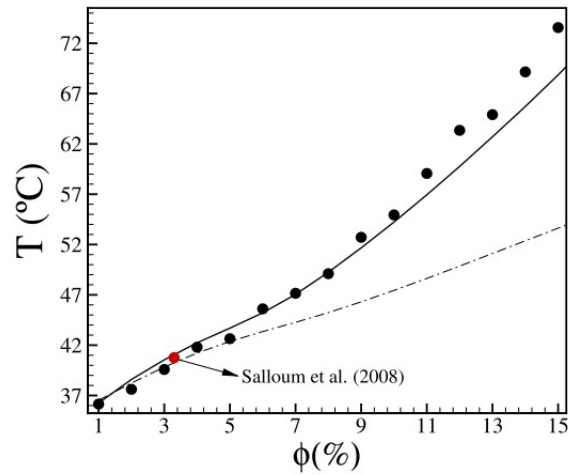


Figura 2.2: Temperatura em função de ϕ . Os círculos preenchidos mostram resultados numéricos. A linha contínua representa a teoria assintótica para $\lambda \neq 0$ e a linha pontilhada representa a teoria assintótica na ausência de interação entre partículas ($\lambda = 0$). Os parâmetros usados foram: $\omega_{dim} = 184kHz$, $H_0 = 3kAm^{-1}$, $\eta = 0.0012Pa \cdot s$, $M_d = 446kAm^{-1}$, $a = 5nm$

2.3.2 Parâmetros Adimensionais relevantes

Afim de compreender melhor o problema de magnetohipertermia, é conveniente dedicar uma seção deste capítulo para a discussão do significado físico de alguns parâmetros adimensionais que fazem parte de problemas de MHT e que serão explorados ao longo do desenvolvimento das simulações. São eles:

- $\phi \rightarrow$ é um parâmetro relacionado à aspectos mais relacionado à geometria do problema que indica a **fração volumétrica** ocupada pelas nanopartículas magnéticas em relação ao volume total do fluido base. Quanto maior o valor deste parâmetro, mais concentrado é o regime, em menores valores, os regimes são mais diluídos, o que interfere diretamente nas interações do tipo partícula-partícula.
- $\alpha \rightarrow$ este parâmetro indica uma relação entre duas energias de diferentes origens diferentes, sua interpretação física é uma comparação entre a relevância da energia provinda do campo magnético externo em relação a energia gerada pelos efeitos da flutuação térmica (i.e energia browniana).
- $\lambda \rightarrow$ parâmetro que compara a relevância das forças magnéticas dipolares induzidas e as forças de natureza Browniana, um aumento no valor deste parâmetro indica que as forças de natureza magnética são mais relevantes naquele cenário.
- $Pe \rightarrow$ o parâmetro conhecido como número de Péclet Pe , indica uma relação entre a escala de tempo característica do problema e a escala de tempo browniana, dada por a^2/D_0 . Um valor de $Pe = 1$ indica que a escala de tempo característica do problema é, simplesmente, a própria escala de tempo de difusão browniana.

Capítulo 3

Validação do código computacional

3.1 Solução assintótica para $M_z(t)$

Afim de validar o código utilizado nas simulações que serão realizadas ao longo deste trabalho, é prudente comparar os resultados obtidos por meio delas com resultados analíticos no contexto de magnetohipertermia. Para isso, um cálculo teórico da taxa de crescimento de temperatura $\langle d\theta/dt \rangle$ foi obtido para o limite assintótico de ferrofluidos diluídos e semi-diluídos (i.e. $0 < \phi \leq 0.10$). Como esta previsão teórica foi utilizada para testar os resultados de nossas simulações, apenas uma abordagem breve é abordada aqui, é possível encontrar uma descrição mais detalhada destes cálculos nas referências [Berkov et al. 2006, Berkov et al. 2009].

A função que descreve a magnetização adimensionalizada em função do tempo é dada assintoticamente por:

$$\mathbf{M}(\alpha_e(t)) = M(\alpha_e) \mathbf{e}_h, \quad (3.1)$$

onde

$$M(\alpha_e(t)) = \mathcal{L}(\alpha_e(t)) + 8\phi\lambda\mathcal{L}(\alpha_e(t))\mathcal{L}'(\alpha_e(t)) \quad (3.2)$$

e

$$\mathbf{e}_h = \frac{\mathbf{H}_e}{H_e}. \quad (3.3)$$

Aqui, $\mathcal{L}(\alpha_e)$ é a função clássica de Langevin $\mathcal{L}(x) = \coth(x) - 1/x$ com $\mathcal{L}'(x) = d\mathcal{L}(x)/dx$ [Rosenweig 2013], \mathbf{H}_e é o campo magnético efetivo.

O campo magnético efetivo adimensional α_e e o vetor \mathbf{e}_h são determinados por meio da solução do seguinte sistema não-linear de equações diferenciais

$$\frac{d\alpha_e}{dt} = \frac{3}{4Pe} \left[\frac{B(\alpha_e) - A(\alpha_e)}{J(\alpha_e)} (\mathbf{e}_h \cdot \delta\boldsymbol{\alpha}) \right] \quad (3.4)$$

e

$$\frac{d\mathbf{e}_h}{dt} = -\frac{3}{4Pe} \left[\frac{A(\alpha_e)}{M(\alpha_e)} \left(\delta\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{e}_h (\mathbf{e}_h \cdot \delta\boldsymbol{\alpha}) \right) \right], \quad (3.5)$$

com $\delta\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}_e - \boldsymbol{\alpha}$ e $\alpha_e = \mu_0 m \mathbf{H}_e / (k_B \theta_0)$. O valor de equilíbrio de $\boldsymbol{\alpha}$ para campos externos oscilatórios 1D é dado por:

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{\mu_0 m H_0}{k_B \theta_0} \sin(\omega t) \hat{e}_z, \quad (3.6)$$

E as funções $A(\alpha_e)$, $B(\alpha_e)$ e $J(\alpha_e)$, são definidas como:

$$A(\alpha_e) = 1 - \frac{\mathcal{L}(\alpha_e)}{\alpha_e} + 8\phi\lambda \left[\mathcal{L}^2(\alpha_e) - C(\alpha_e) \right] \frac{\mathcal{L}(\alpha_e)}{\alpha_e}, \quad (3.7)$$

$$B(\alpha_e) = C(\alpha_e) + 8\phi\lambda \left[\mathcal{L}^2(\alpha_e) - C(\alpha_e) \right] \frac{\mathcal{L}(\alpha_e)}{\alpha_e}, \quad (3.8)$$

$$J(\alpha_e) = \mathcal{L}'(\alpha_e) + 8\phi\lambda \left[(\mathcal{L}''(\alpha_e))^2 + \mathcal{L}(\alpha_e) \mathcal{L}''(\alpha_e) \right], \quad (3.9)$$

com $C(\alpha_e) = 1 - 3\mathcal{L}(\alpha_e)/\alpha_e$.

3.2 Comparação entre solução computacional e analítica

Utilizando o mesmo código em trabalhos anteriores, foi possível comparar os resultados obtidos computacionalmente com aqueles calculados de forma analítica pela teoria de Berkov, desenvolvida na seção anterior. Os resultados aqui mencionados podem ser encontrados na referência [Guimaraes et al. 2020] que aborda de forma detalhada o cálculo da susceptibilidade complexa em contextos de excitação por campo oscilatório único. Para avaliar a correspondência dos resultados obtidos computacionalmente, os resultados de susceptibilidade (complexa e imaginária) e variação temporal da temperatura $\langle d\theta/dt \rangle$ serão ilustrados e comparados àqueles obtidos analiticamente.

Na figura 3.1, é possível ver a correspondência entre os resultados analíticos da teoria de Berkov para a susceptibilidade complexa em suas parcelas reais e imaginárias. É nítido que existe um alto grau de congruência entre os resultados analíticos e computacionais, uma vez que a linha pontilhada e os pontos preenchidos estão quase perfeitamente sobrepostos. Afim de obter uma análise ainda mais precisa para o caso onde $Pe \approx 1$, o gráfico menor na figura 3.1(b) foi traçado, e é possível observar ainda um grau de proximidade satisfatório entre resultados analíticos e computacionais.

Na figura 3.2 são apresentadas três curvas que mostram a taxa temporal do aumento de temperatura em função da frequência adimensional ω . É interessante observar que aqui também existe uma congruência significativa entre o modelo analítico e o computacional. No

entanto, é fulcral notar que para valores mais baixos de ϕ , ou seja, regimes mais diluídos, existe uma correspondência maior entre a teoria de Berkov e os resultados obtidos por meio do técnica de soma de Ewald (computacionais). Essa relação entre ϕ e o grau de congruência com o modelo analítico pode ser explicado pelo fato de esta bateria de simulações não considerar os torques periódicos, de tal sorte que, quanto mais relevantes forem as interações do tipo partícula-partícula, menos as simulações desta bateria estarão adequadas ao caso estudado. Porém, mesmo desta forma, é visível que os resultados são suficientemente próximo da teoria analítica para validar o código utilizado.

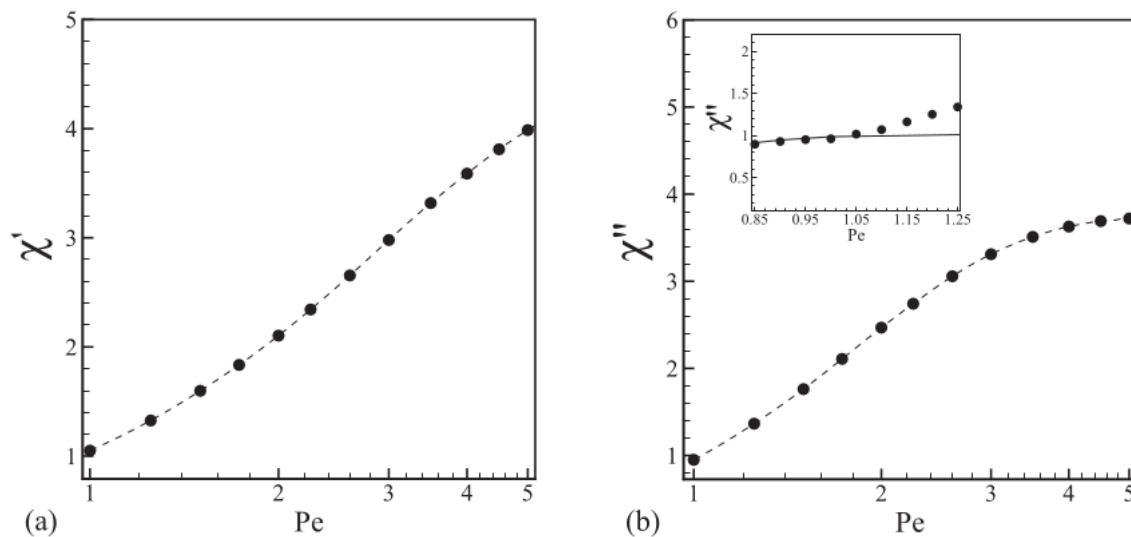


Figura 3.1: Partes real e imaginária da susceptibilidade complexa em função do número de Péclet. Parâmetros usados na simulação $\alpha = 1, \lambda = 1, \omega = 1, \phi = 0.1$. Os círculos preenchidos representam os resultados computacionais obtidos utilizando a técnica de soma de Ewald. O resultado obtido por meio da teoria de Berkov é representado pela linha pontilhada.

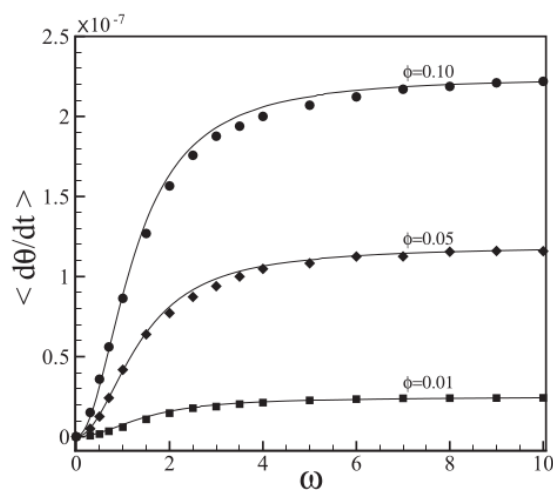


Figura 3.2: Taxa adimensional do aumento da temperatura em função da frequência ω . Círculos preenchidos denotam os resultados obtidos por meio da técnica de soma de Ewald. O resultado obtido por meio da teoria de Berkov é representado pela linha contínua. Parâmetros usados na simulação $\alpha = 1, \lambda = 1, \omega = 1, \phi = 0.1$.

Capítulo 4

Resultados

4.1 Frequência de excitação única

Nesta seção, os resultados apresentados foram obtidos por meio da simulação com apenas uma frequência de excitação. Ao contar apenas com uma frequência externa, é evidente que o fenômeno de batimento não existe, desta forma, para este conjunto de simulações, o valor de ω_1 foi variado de 0.5 a 1.5. O tempo de simulação foi calculado de forma que 4 ciclos de excitação fossem obtidos para cada valor de ω , sendo que, o primeiro ciclo foi sempre descartado nas análises afim de eliminar o caráter transiente do problema. O número de partículas magnéticas utilizado nas simulações foi de 250 e o número de realizações configurado para as varreduras foi de 50. Em virtude de apresentarem custo computacional não muito alto e oferecerem resultados satisfatórios, o número de partículas e a quantidade de realizações foram mantidos constantes para todas as simulações que serão apresentadas no presente trabalho.

4.1.1 Avaliação da resposta em regime diluído ($\phi = 0.05$ $\lambda = 1$)

Por ser o caso mais simples abordado neste trabalho, essa bateria será tratada como um caso controle, ou seja, os resultados posteriores provenientes de diferente tipos de excitação externa e parâmetros variados poderão ser comparados com os resultados apresentados nesta etapa do trabalho.

Como parâmetros desta simulação foram usados

$$\phi = 0.05, Pe = 1, \alpha = 1, \lambda = 1$$

Na imagem 4.1(a), é apresentada a série temporal do campo externo aplicado para $\omega_1 = 1$. Considerando que, para diferentes valores de ω_1 , o mesmo perfil de excitação será observado,

com alteração apenas no período da onda, a representação dos outros gráficos foi suprimida. O mesmo raciocínio foi aplicado em relação à figura 4.1(b), que representa a magnetização, que é a resposta ao campo externo aplicado. Analisando estas figuras, se torna claro que a magnetização tem um padrão muito similar ao do próprio campo H . Isso é esperado, uma vez que este primeiro caso analisado é um dos mais simples possíveis, onde os torques magnéticos não são avaliados periodicamente e existe apenas uma frequência de excitação atuando no problema. Neste contexto, não avaliar os torques magnéticos periodicamente, significa desprezar as interações que existem entre as partículas que constituem o ferrofluido. Esta abordagem pode ser aplicada aqui, uma vez que o regime é muito diluído ($\phi = 0.05$) e os parâmetros físicos relevantes para o problema são unitários (Pe, α e λ). Nesta situação, como mostra a literatura [Gontijo and Guimarães], é possível não avaliar os torques magnéticos de forma periódica e obter uma solução próxima da solução teórica de modo mais barato em termos computacionais.

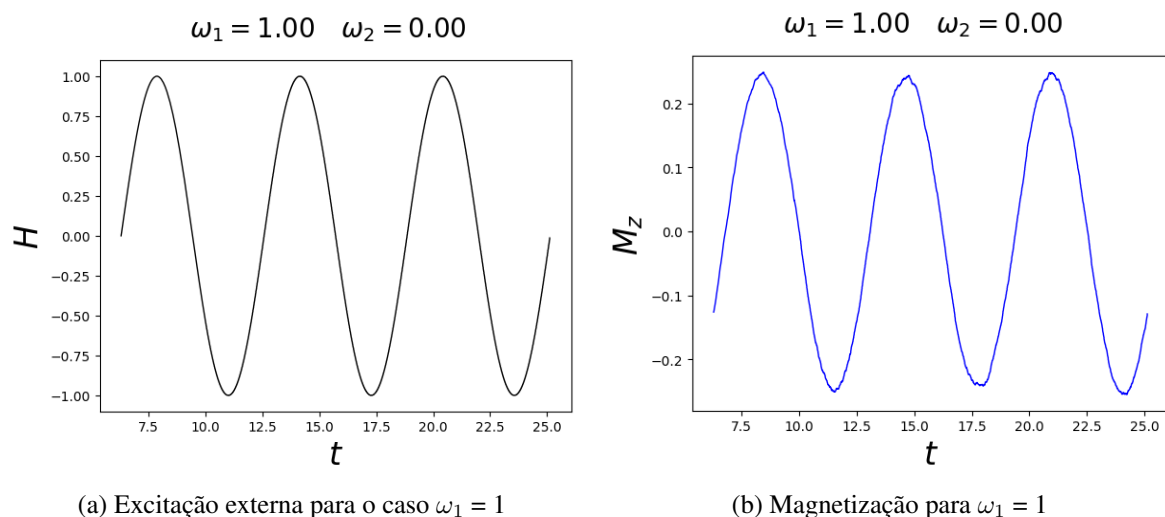
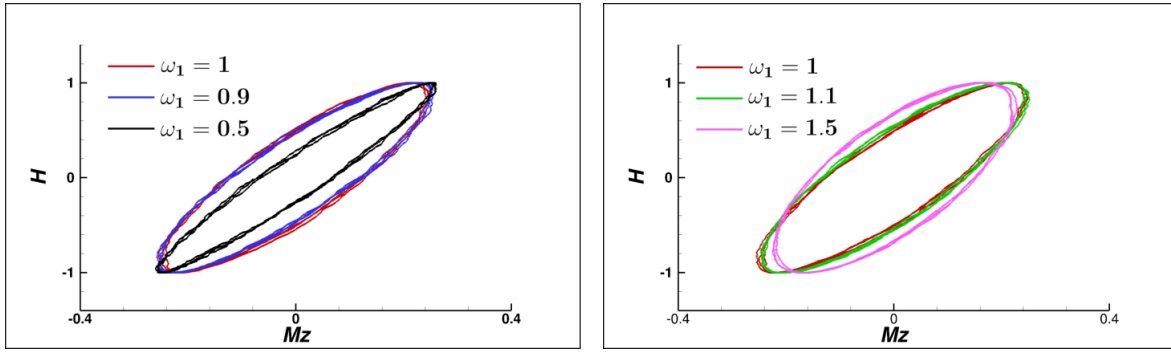


Figura 4.1: Séries temporais para $\omega_1 = 1$

Conhecendo o comportamento do campo externo H e da magnetização M , é possível relacionar as duas grandezas em um gráfico chamado curva de histerese. Esta curva é de fundamental importância para o estudo, pois, como exposto anteriormente, é o cálculo de sua área interna que fornece a energia dissipada durante o período de excitação do ferrofluido. A figura 4.2 contém a representação das curvas de histerese para diferentes valores de ω_1 .



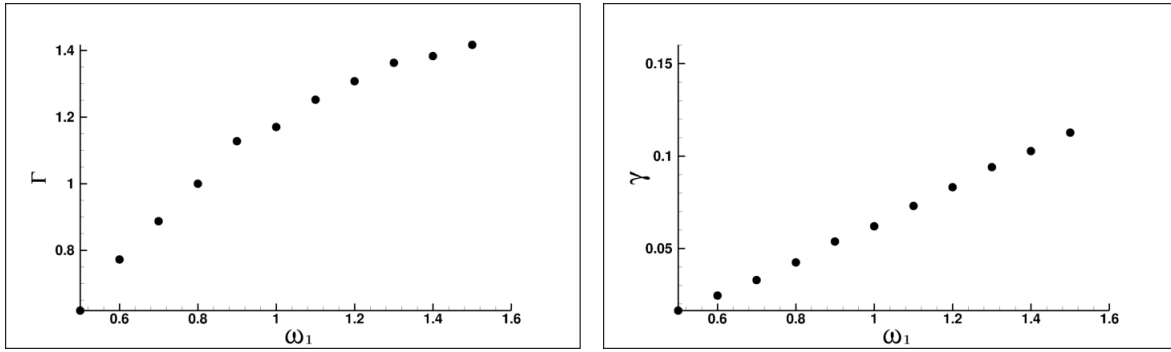
(a) Curvas de histerese para 3 valores diferentes de ω_1 (b) Curvas de histerese para 3 valores diferentes de ω_1

Figura 4.2: Curvas de histerese sobrepostas

Nos gráficos da figura 4.2 parece existir uma tendência de aumento da área dentro da curva de histerese conforme o valor de ω_1 cresce. No entanto, é difícil confirmar esta tendência somente observando o resultados gráficos, por isso, foi utilizada uma biblioteca em *Python* capaz de realizar o cálculo destas áreas. Como mostrado na equação 2.31, a área interna em uma curva de histerese representa a energia dissipada no ciclo analisado, sendo equivalente a integral de HdM que será representada sempre como Γ de agora em diante. Os resultados obtidos para esta grandeza estão representados na figura 4.3(a). Analisando esta figura, é possível perceber uma tendência de crescimento com o aumento da frequência de excitação. Por este gráfico, tal crescimento aparenta ter um limite assintótico.

No entanto, é necessário se atentar ao fato de que cada simulação possui um tempo diferente, uma vez que a normalização foi feita em função do número de ciclos que gostaríamos de obter para cada frequência. Logo, é evidente que frequências menores tiveram um tempo de simulação maior. Diante deste fato, foi considerado mais adequado analisar os valores de integral de HdM em uma média temporal, ou seja, dividindo todos os valores mostrados na figura 4.3(b) pelos seus respectivos tempos de simulação, esta grandeza será sempre representada por γ no presente trabalho. A partir deste raciocínio, a curva 4.3(b) foi traçada. É possível perceber que quando se calcula média temporal da dissipação de energia existe uma tendência de crescimento quase perfeitamente linear em função do aumento da frequência de excitação.

Nas simulações analisadas nesta seção, os parâmetros que ditam as interações entre partículas, que são responsáveis por contrapor os efeitos do campo aplicado, são muito baixos, pois o regime é muito diluído e possui um baixo valor de λ . Desta forma, é possível associar o aumento da energia dissipada diretamente ao aumento da frequência de excitação, que excita as partículas de forma mais intensa, uma vez que as interações entre partículas não são consideradas no problema.



(a) Integral de HdM (Γ) em função dos valores de ω_1 (b) Média temporal da integral de HdM (γ) em função dos valores de ω_1

Figura 4.3: Dissipação de energia em termos de Γ e γ em função de ω_1

Resolvendo a equação da energia por meio de um código em *Fortran* que utiliza o método de diferenças finitas em 2D para a visualização do campo de temperatura resultante em uma região tumoral submetida ao aquecimento gerado por cada simulação desta bateria, o resultado mostrado na figura 4.4 será obtido. As frequências apresentadas nesta figura foram dimensionalizadas usando as relações expostas na seção 2.4.1 e as correspondências entre frequência dimensional e adimensional das frequências escolhidas para análise de campo de temperatura estão mostradas na tabela abaixo:

Na figura 4.4, o tumor é representado pela região **A**, delimitada pelo quarto de círculo de raio $0.015m$, enquanto a região **B** representa uma área de tecido saudável. É nítido que conforme a frequência do campo aumenta, ocorre um aumento da temperatura máxima na região tumoral. Este efeito era esperado e acompanha o crescimento visto no valor de γ mostrado na figura 4.3.

ω_1	ω_1 dim
0.6	220.2KHz
1.0	366.7KHz
1.4	513.8KHz
2.2	807.4KHz

Tabela 4.1: Conversão entre ω_1 adimensional e dimensional

Além dos campos de temperatura, na figura 4.5, estão mostrados dois gráficos. O gráfico do lado esquerdo mostra o perfil de temperatura extraído ao longo de uma linha reta no campo de temperatura final onde $y = 0.01m$ e a coordenada x varia de $0m$ a $0.018m$, esta reta será chamada de r e todos os gráficos de perfil apresentados serão traçados considerando a temperatura ao longo dela. Avaliando este gráfico na figura 4.5, percebe-se que, em toda a linha, a temperatura é maior para as simulações de maior frequência. Já no gráfico da direita, é possível ver a evolução temporal de temperatura no tumor, como esperado, frequências

mais altas atingem uma temperatura mais alta. No entanto, é possível ver que o tempo para que seja atingida uma temperatura estável é similar em todas as frequências. É interessante notar que no caso simulado que é mais próximo daquele resultado obtido no trabalho de [Salloum et al. 2008], que é aquele em que o campo equivale a $\omega_1 = 220.2kHz$. No caso do trabalho de [Salloum et al. 2008], um campo de $184kHz$ com um $\phi = 3.3\%$ atinge uma temperatura de aproximadamente $41^\circ C$, enquanto a simulação do presente trabalho de $\omega_1 = 220.2kHz$ e $\phi = 5\%$ atinge uma temperatura que é cerca de $10^\circ C$ maior, em torno de $51^\circ C$. Assim, consideramos que é uma diferença coerente em relação a um resultado já obtido experimentalmente.

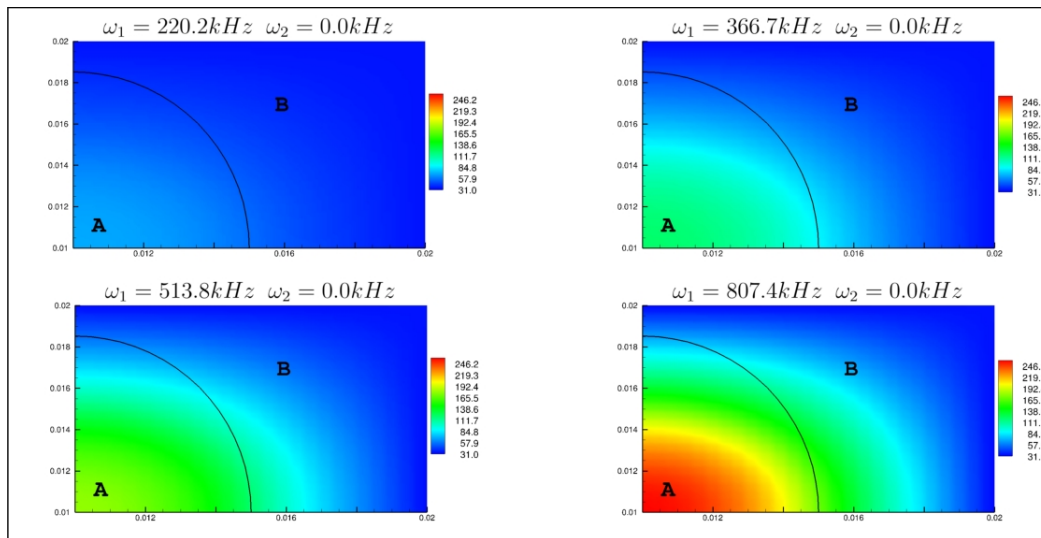


Figura 4.4: Campos de temperatura gerados a partir de diferentes frequências na primeira bateria de simulações

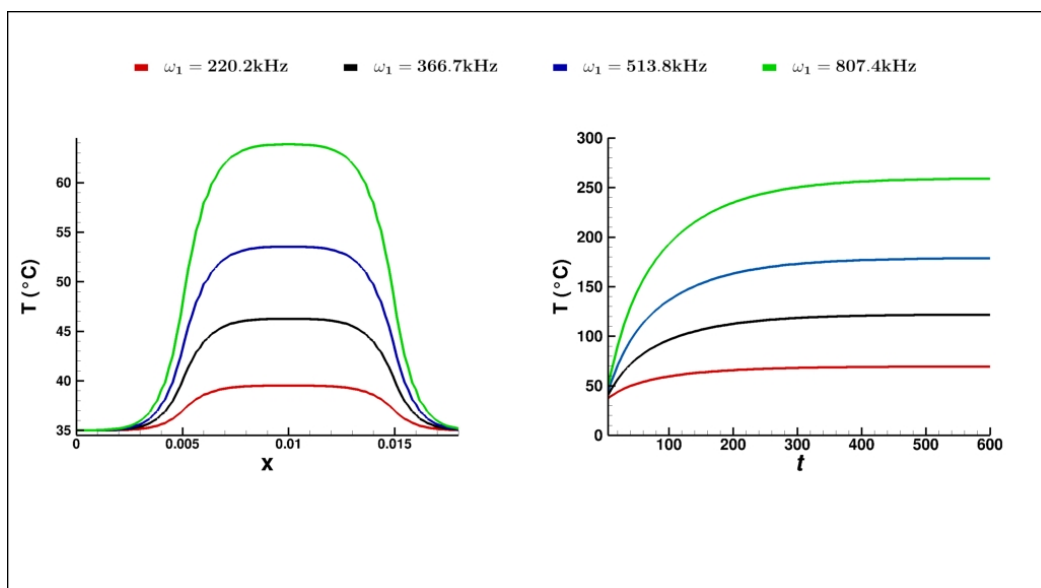


Figura 4.5: Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo

4.1.2 Avaliação da resposta em regime concentrado para λ unitário ($\phi = 0.15$ $\lambda = 1$)

Os parâmetros utilizados para este conjunto de simulações foram:

$$\phi = 0.15, Pe = 1, \alpha = 1, \lambda = 1$$

Agora, é necessário observar que existe um regime significativamente mais concentrado em virtude do aumento do parâmetro ϕ de 0.05 para 0.15. Por ser um regime com concentração mais alta, para considerar os efeitos de interações partícula-partícula, os torques magnéticos serão calculados de forma periódica, assim os efeitos destas interações serão considerados com maior precisão. No entanto, é relevante perceber que todos os demais parâmetros ainda são mantidos como unitários. Para avaliar os efeitos dessa bateria de simulações foram escolhidos 3 valores diferentes de ω_1 , pois o custo computacional tende a aumentar em razão do cálculo periódico dos torques magnéticos, de tal sorte que foram escolhidos 2 valores inicialmente $\omega_1 = 0.6$ e $\omega_1 = 1.4$. Se observarmos estes valores, veremos que eles são equidistantes do valor $\omega_1 = 1$, que é um valor chave para nossa análise, logo o intuito era entender o comportamento físico do sistema em uma frequência abaixo da frequência unitária e em uma outra frequência acima dela. No entanto, ao avaliar os resultados das séries temporais, principalmente os que serão expostos na próxima subseção, a análise de uma frequência ainda maior foi julgada interessante, por isso, foi incluída a análise para uma frequência $\omega_1 = 2.2$.

Na figura 4.6, tem-se a representação das séries temporais da magnetização em z para as frequências supracitadas. Aqui, a curva que representa o campo externo H foi suprimida, uma vez que a excitação externa H é o parâmetro controlado pelo usuário e não fornece informações tão ricas sobre o comportamento do sistema físico em si, portanto, para observar melhor a resposta do ferrofluido, apenas o gráfico da magnetização foi mantido.

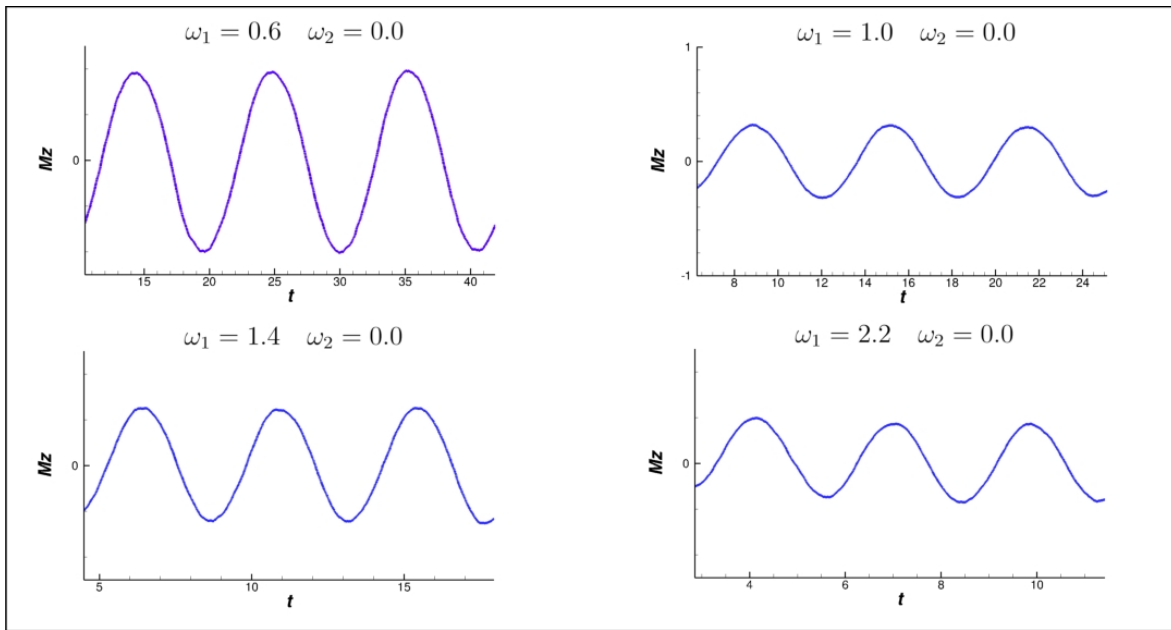


Figura 4.6: Séries temporais de M_z para a segunda bateria de simulações

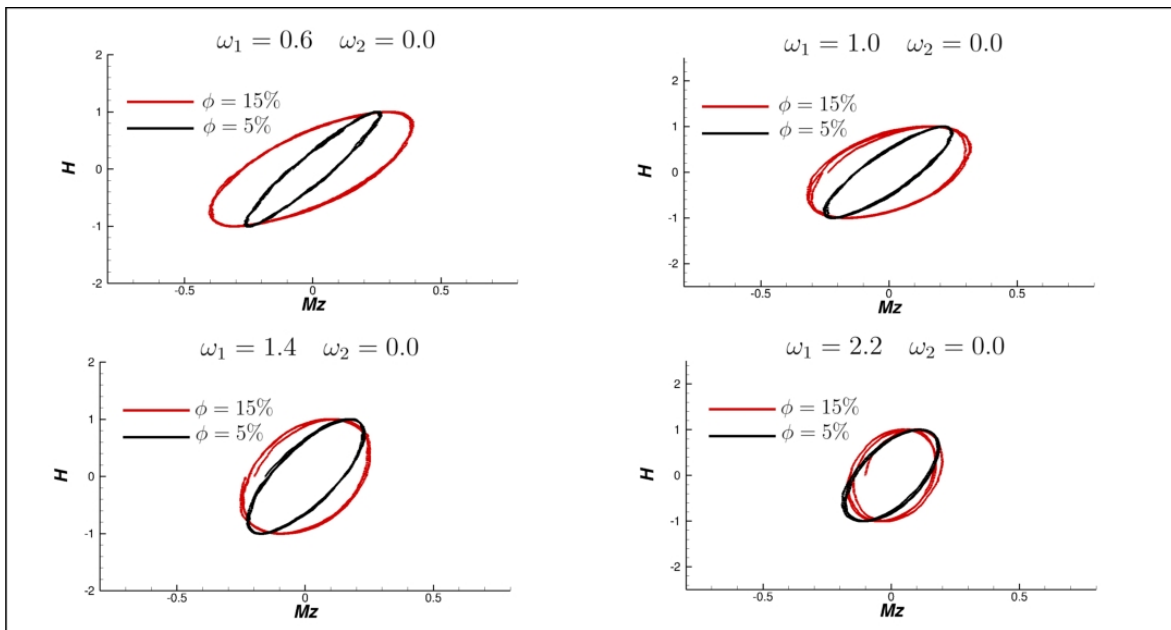
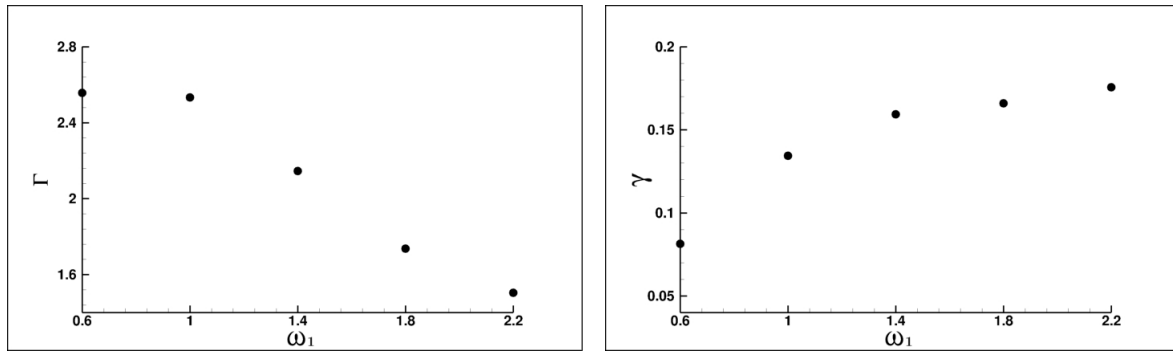


Figura 4.7: Curvas de histerese para a segunda bateria de simulações



(a) Integral de HdM (Γ) em função dos valores de ω_1 (b) Média temporal da integral de HdM (γ) em função dos valores de ω_1

Figura 4.8: Dissipação de energia em termos de Γ e γ em função de ω_1

Para analisar os campos de temperatura, foram selecionadas as seguintes frequências expostas na tabela abaixo em suas formas dimensionais e adimensionais:

ω_1	ω_1 dim
0.6	220.2kHz
1.0	366.7kHz
1.4	513.8kHz
2.2	807.4kHz

Nos campos de temperatura, é possível perceber, novamente, um aumento da temperatura máxima conforme a frequência aumenta. Além disso, é interessante observar que com os parâmetros utilizados na segunda bateria de simulações, a temperatura máxima que é obtida no tumor é maior do que aquela alcançada na primeira bateria. A partir dessa observação, é razoável afirmar que um aumento no ϕ é responsável por uma maior dissipação de energia no ferrofluido e consequentemente um maior aquecimento da região tumoral, pois, entre a diferença nas análises de temperatura entre a primeira e a segunda bateria, é justamente a concentração de partículas.

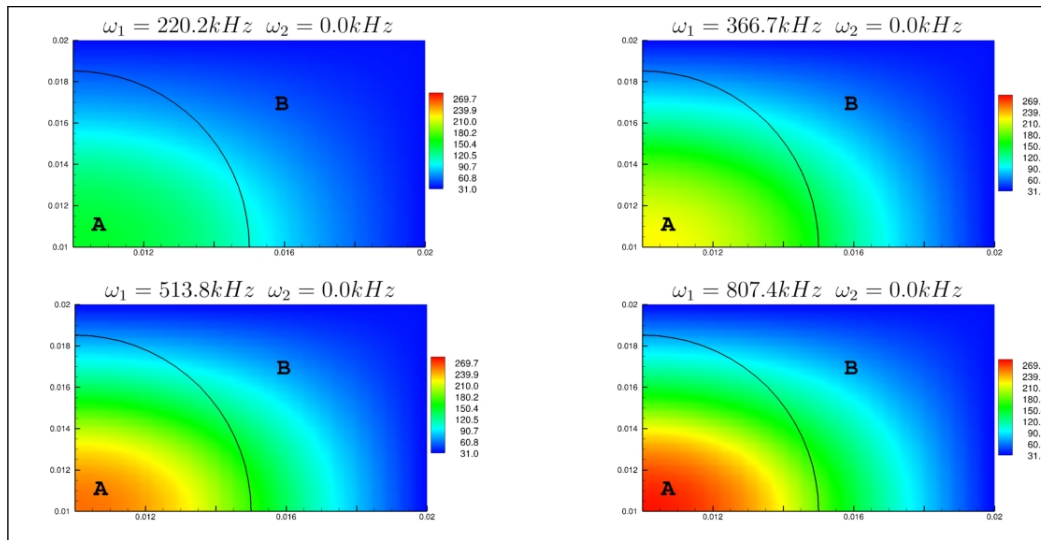


Figura 4.9: Campos de temperatura gerados a partir de diferentes frequências na primeira bateria de simulações

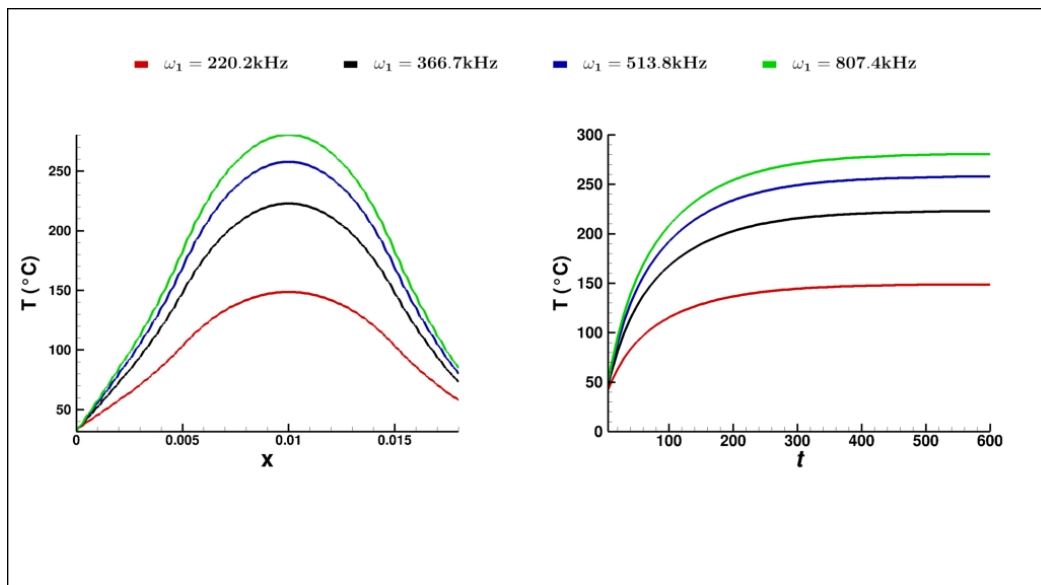


Figura 4.10: Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo

Analisando agora os gráficos mostrados na figura 4.10, é interessante observar que as diferenças entre temperaturas atingidas entre as maiores frequências são menores do que aquelas verificadas na primeira bateria de simulações. Entretanto, novamente se verifica uma proximidade muito grande no tempo necessário para que se atinja uma temperatura estável.

4.1.3 Avaliação da resposta em regime concentrado para $\lambda \neq 1$ ($\phi = 0.15$ $\lambda = 3$)

Os parâmetros utilizados para este conjunto de simulações foram:

$$\phi = 0.15, Pe = 1, \alpha = 1, \lambda = 3$$

Analisando a figura 4.11, é interessante observar os aparentes ruídos que possuem maior intensidade no caso em que $\omega_1 = 0.6$. Tais perturbações na resposta ao campo externo aplicado podem ser explicadas como uma consequência direta das interações que ocorrem entre as partículas magnéticas que constituem o ferrofluido. Nos gráficos da figura 4.6, estes ruídos não aparecem com intensidade relevante em virtude do valor do parâmetro λ , que, naquelas simulações, foi considerado unitário. Conforme mencionado em seções anteriores, um aumento no valor do parâmetro λ indica um aumento na importância das forças magnéticas dipolares em relação às forças de natureza Browniana. Assim, é evidente que o aumento de λ implica em um aumento na desordem da resposta ao campo aplicado, tanto nas séries temporais quanto nas curvas de histerese apresentadas na figura 4.12.

No entanto, se observarmos atentamente os gráficos das figuras 4.6 e 4.12, é visível que quanto maior a frequência de excitação externa, menos ruídos existem na resposta temporal M_z e mais comportadas se mostram as curvas de histerese. Essa observação mostra que a frequência do campo é capaz de alterar a relevância das interações entre partículas para a resposta final do fluido, quando ω_1 cresce, o campo externo interage de forma mais frequente com as nanopartículas magnéticas, o que faz com que elas tenham menos tempo para interagir entre si sem a influência deste campo, de tal sorte que a resposta se mostra mais organizada e menos influenciada pelas interações dipolares. Observando agora o comportamento de γ , na figura 4.13, é possível observar de novo uma tendência de crescimento da dissipação de energia em função do aumento e ω_1 .

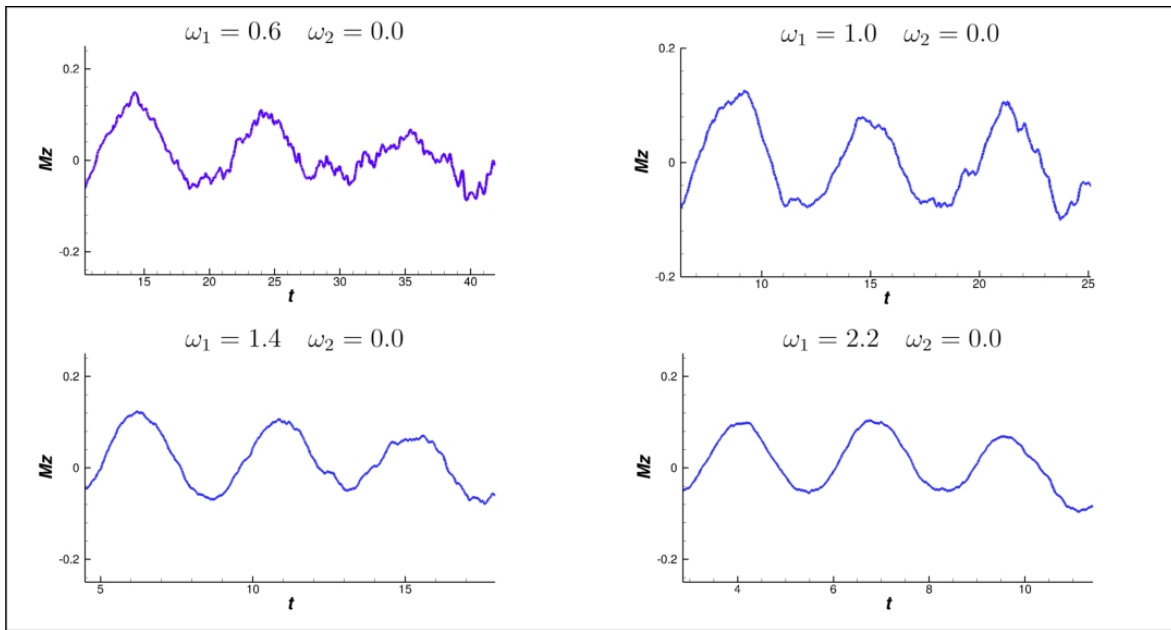


Figura 4.11: Séries temporais de M_z para a terceira bateria de simulações

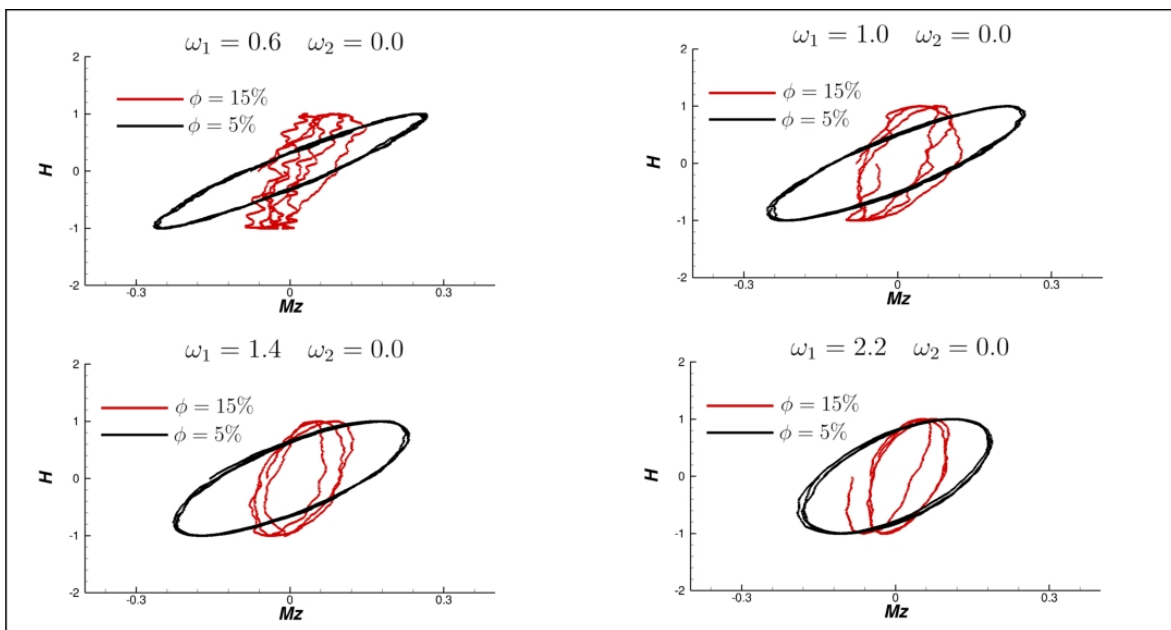
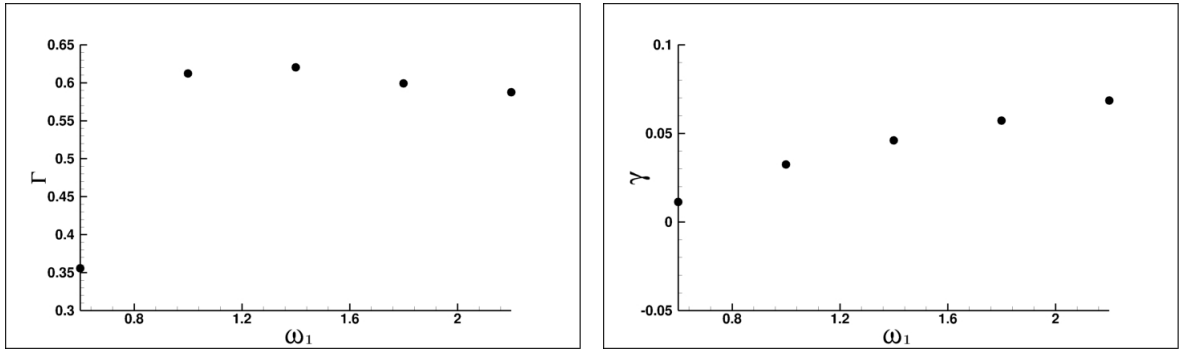


Figura 4.12: Curvas de histerese para a terceira bateria de simulações



(a) Integral de HdM (Γ) em função dos valores de ω_1 (b) Média temporal da integral de HdM (γ) em função dos valores de ω_1

Figura 4.13: Dissipação de energia em termos de Γ e γ em função de ω_1

Analisando os campos de temperatura e os perfis plotados nas imagens 4.14 e 4.15, é possível concluir que as temperaturas tendem a aumentar com o aumento da frequência externa de excitação. No entanto, a frequência de $366.7kHz$ apresenta temperaturas maiores do que a frequência de $513.8Hz$ nesta região específica. Porém, quando o gráfico de evolução temporal no lado direito da figura é analisado, percebe-se que a tendência de aumento da temperatura máxima atingida no tumor conforme o crescimento da frequência de excitação externa se mantém. Quando analisamos a temperatura máxima obtida nos campos de temperatura, é nítido que há uma redução desta grandeza em comparação a segunda bateria de simulações. Este fenômeno é coerente com o que ocorre no gráfico mostrado na figura 4.16 e pode ser atribuído a atuação do mecanismo de interação entre partículas.

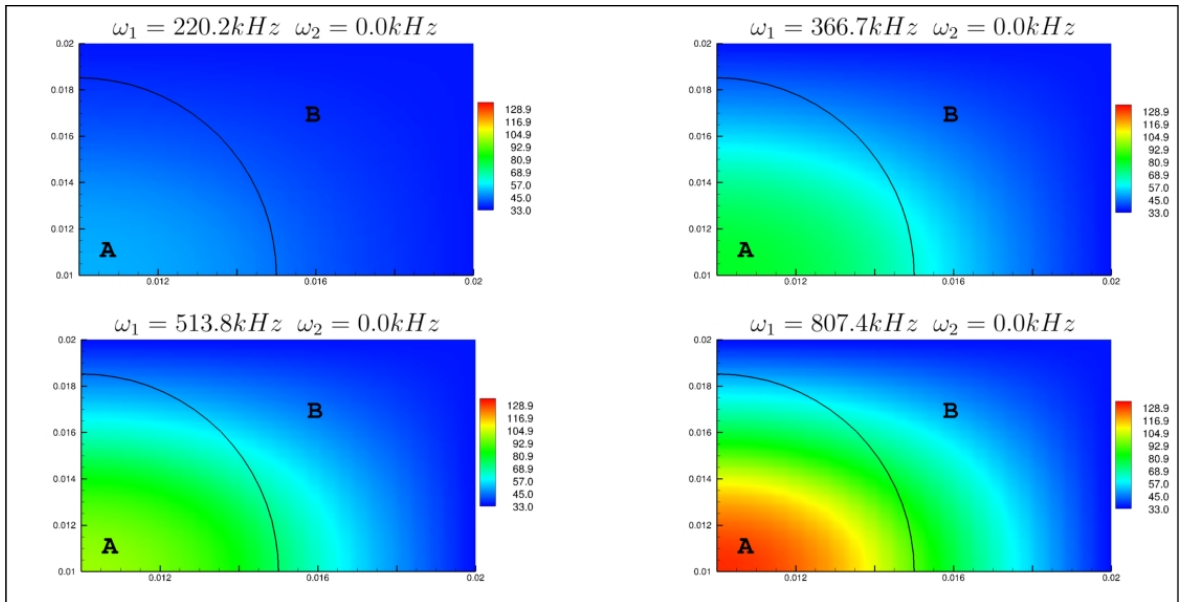


Figura 4.14: Campos de temperatura gerados a partir de diferentes frequências na primeira bateria de simulações

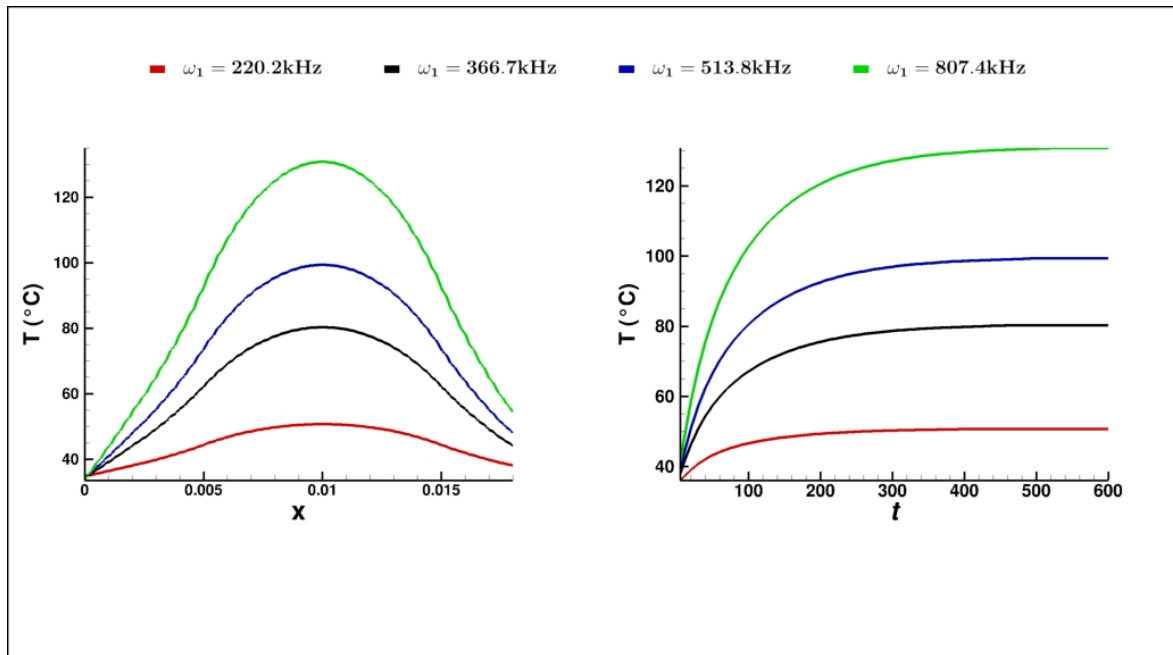


Figura 4.15: Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo

Agora, é possível comparar os resultados obtidos para os 3 casos diferentes simulados com apenas uma frequência de excitação. Foram rodadas simulações com os seguintes parâmetros, onde os dois últimos tiveram os torques magnéticos computados de forma periódica:

- $\phi = 0.05, Pe = 1, \alpha = 1, \lambda = 1$
- $\phi = 0.15, Pe = 1, \alpha = 1, \lambda = 1$
- $\phi = 0.15, Pe = 1, \alpha = 1, \lambda = 3$

Na figura 4.16, tem-se uma comparação entre a taxa temporal de dissipação de energia para cada um dos casos. É visível que o caso em que existe uma maior dissipação de energia por unidade de tempo é aquele em que $\phi = 0.15$ e $\lambda = 1$, ou seja, aumentar apenas a concentração de partículas magnéticas aparenta resultar em um aumento da capacidade da dissipação de energia. No entanto, ao manter este mesmo nível de concentração de partículas magnéticas e aumentar o parâmetro λ , existe uma redução no valor de γ , esse fenômeno pode ser interpretado como mais uma evidência de que o aumento de interação entre partículas dificulta a sua interação com o próprio campo externo, reduzindo assim sua capacidade de dissipação de energia.

Na imagem 4.17, o gráfico à esquerda mostra uma comparação entre os perfis de temperatura desenvolvidos para a frequência adimensional $\omega_1 = 1.4$ que em Hz é equivalente a $513.8kHz$. Ao longo do perfil delimitado pela reta \mathbf{r} , a maior temperatura é atingida quando $\phi = 0.15$ e $\lambda = 1$, uma concentração mais alta do que a existente em uma primeira bateria

mas com um valor unitário de λ diferente da terceira bateria. Além disso, é visível que ao longo da região específica da reta \mathbf{r} , a segunda bateria de simulações apresenta temperaturas maiores. No entanto, a maior temperatura máxima atingida entre as duas simulações é obtida quando $\phi = 0.05$ e $\lambda = 1$, isto condiz com o que foi observado na figura 4.16 que mostra uma maior taxa de dissipação na primeira bateria de simulações.

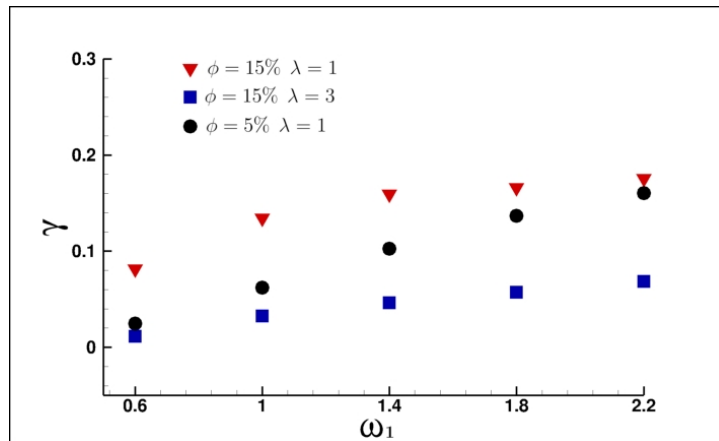


Figura 4.16: Comparação entre o valor de γ para os diferentes casos de apenas 1 frequência de excitação

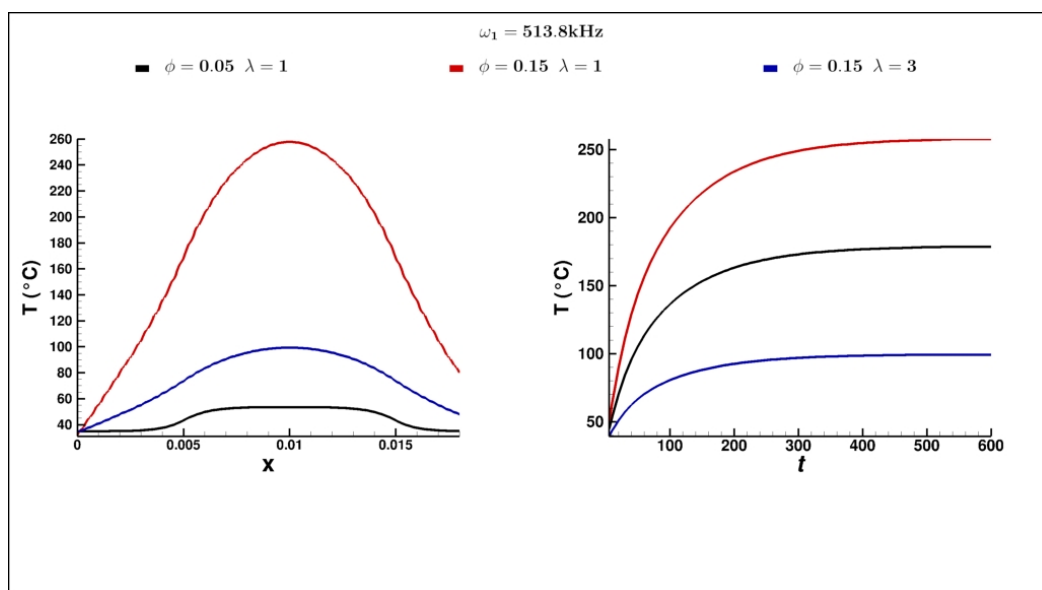


Figura 4.17: Comparação entre os perfis de temperatura para os diferentes casos de campo de 1 frequência

É interessante comentar que os ruídos observados na figura 4.6 podem ter sido gerados por fatores físicos ou até mesmo numéricos. Para tentar esclarecer se os fatores que os geraram eram puramente numéricos ou não, foram realizadas novas simulações com custo computacional extremamente alto que computavam, além dos torques magnéticos, também as forças magnéticas de forma periódica. Esta abordagem tenderia a reduzir ainda mais interferências de origem numérica no problema.

Os gráficos mostrados na figura 4.19 foram obtidos a partir das novas simulações considerando as forças magnéticas de forma periódica. Quando comparamos estas curvas com as obtidas na imagem 4.6, é possível perceber uma redução no ruído presente, mas ainda assim é perceptível que as séries temporais não são tão uniformes. Além disso, quando se observa as curvas de histerese destas mesmas simulações, mostradas na figura ??, é notório que não existe uma uniformidade das curvas, tornando a análise mais difícil em valores mais altos de λ . Em conclusão, consideramos que seria necessário investigar de forma mais intensa a melhor forma de analisar simulações com valores mais altos de λ , é interessante também que outros parâmetros que podem ter interferência na convergência numérica dos resultados (número de partículas e realizações) sejam refinados. Este passo não foi realizado no presente trabalho pois esta análise teria um custo computacional muito elevado para o tempo disponível.

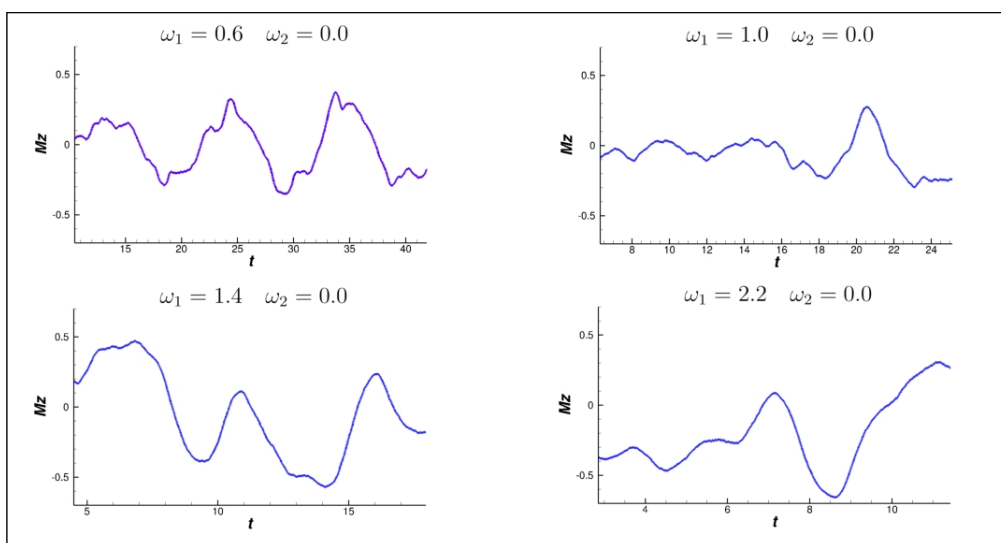


Figura 4.18: Séries temporais de M_z

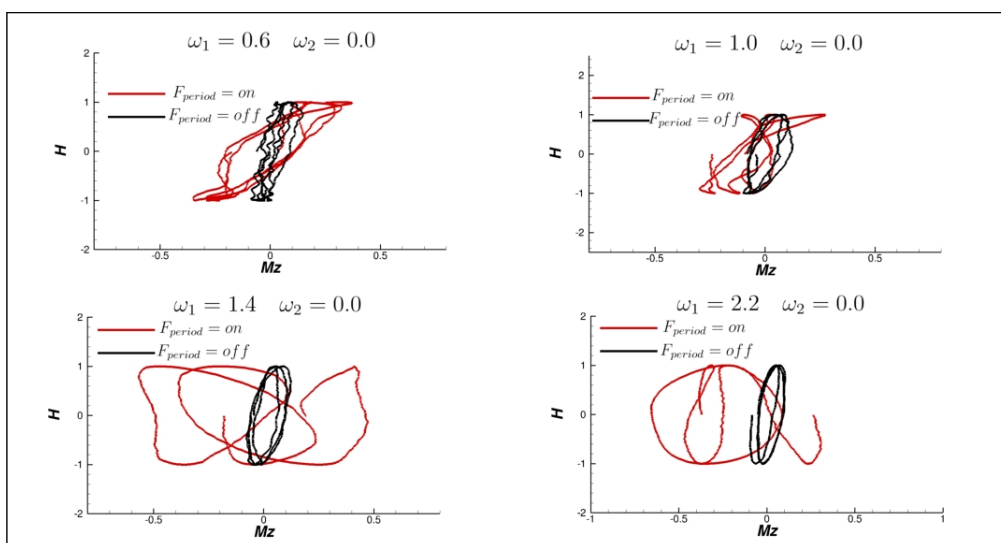


Figura 4.19: Curvas de histerese

4.2 Dupla frequência de excitação

Os resultados apresentados nesta seção são relativos às simulações realizadas com **duas** frequências de excitação. Aqui, é importante ressaltar que o tempo de simulação será aquele que permite captar 4 ciclos da frequência de batimento (onde novamente o primeiro ciclo é descartado), que é dada pela subtração das duas frequências de excitação. Logo, o tempo de simulação em termos das frequência adimensionais pode ser escrito como mostrado na equação 4.1

$$t_{sim} = \frac{2\pi}{|\omega_1 - \omega_2|} \cdot n \quad (4.1)$$

Onde n é o número de ciclos, no caso, $n = 4$. É válido ressaltar que esta abordagem para o cálculo de tempo total de simulação será adotada para todas as simulações com duas frequências a partir desta seção.

A expressão 4.1 é válida para casos em que temos duas frequências de excitação distintas, no caso em que as duas frequências são iguais, o tempo de simulação é calculado em função de apenas 1 frequência, então 4.1 se torna apenas:

$$t_{sim} = \frac{2\pi}{\omega_1} \cdot n \quad (4.2)$$

Assim, a bateria de simulações realizada contará sempre com duas frequências. A primeira frequência ω_1 será variada de 0.5 a 1.5 enquanto a segunda ω_2 será fixada, sendo sempre $\omega_2 = 1$. É válido salientar que para o caso onde $\omega_1 = \omega_2 = 1$, teríamos um tempo de simulação infinito, uma vez que a subtração será igual a 0. Como isso é impossível, o tempo simulado para este caso será o tempo necessário para capturar 4 ciclos de apenas uma onda com frequência adimensional $\omega = 1$.

A partir de agora, por motivos práticos, a notação ω_B será utilizada como termo equivalente a $|\omega_1 - \omega_2|$ representando, portanto, a frequência de batimento.

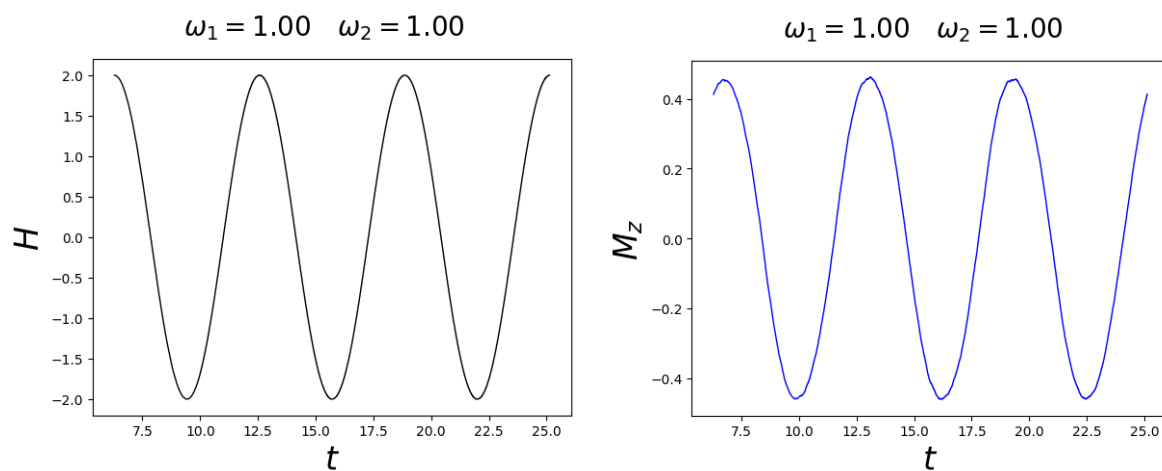
4.2.1 Avaliação da resposta em regime diluído ($\phi = 0.05$ $\lambda = 1$)

Os parâmetros utilizados para este conjunto de simulações foram:

$$\phi = 0.05, Pe = 1, \alpha = 1, \lambda = 1$$

Esta combinação representa o caso mais simples entre os casos com duas frequências analisados no presente trabalho, uma vez que o regime é altamente diluído e os parâmetros ϕ , Pe , α , λ são unitários. Desta forma, assim como foi feito na seção 4.1, que possuía os mesmos parâmetros para o caso de frequência única de excitação, nesta seção os torques magnéticos não serão avaliados de forma periódica, reduzindo tempo computacional sem prejudicar a qualidade dos resultados.

Na imagem 4.20(a), a série temporal do campo H é mostrada, enquanto, na imagem 4.20(b) é possível ver o gráfico da magnetização obtida a partir desta excitação. Nos dois gráficos condensados na figura 4.20, temos o caso em que as duas frequências de excitação coincidem e, portanto, não é possível observar a ocorrência do fenômeno de batimento.



(a) Excitação externa H em função do tempo para $\omega_1 = 1$ e $\omega_2 = 1$ (b) Magnetização M_z em função do tempo para $\omega_1 = 1$ e $\omega_2 = 1$

Figura 4.20: Séries temporais para $\omega_1 = 1$ e $\omega_2 = 1$

Na figura 4.21, observa-se quatro gráficos diferentes para valores variáveis de ω_1 , enquanto ω_2 é mantido fixo e igual a 1. Nas figuras onde $\omega_1 = 0.9$ e $\omega_1 = 1.1$, é possível perceber nitidamente o fenômeno de batimento, onde existe a alternância entre interferências construtivas e destrutivas.

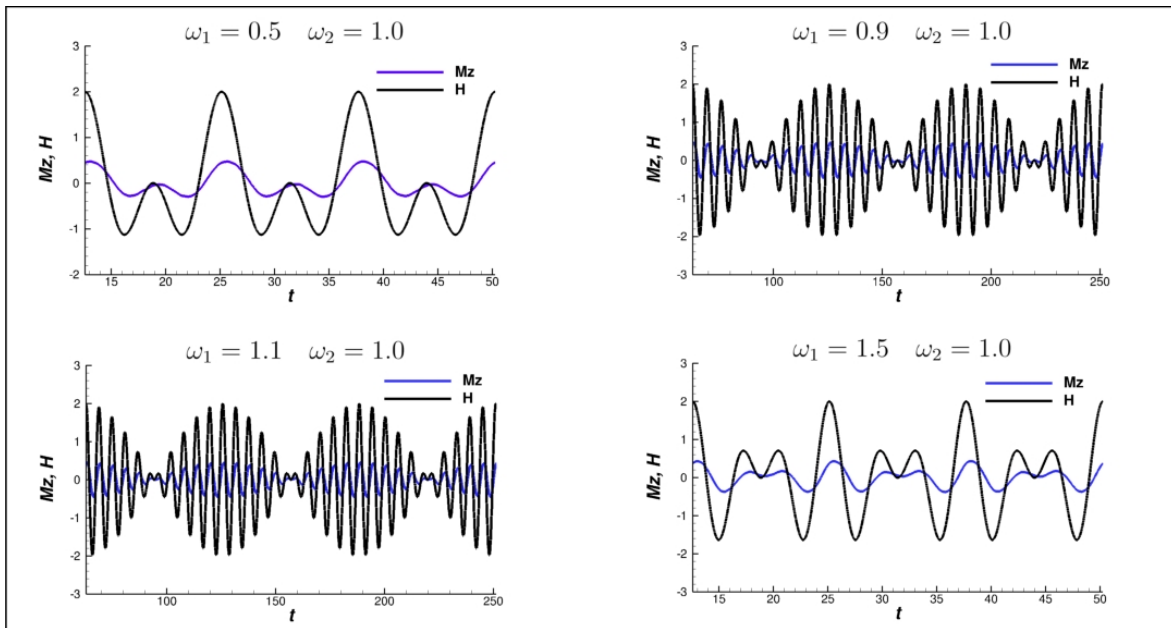


Figura 4.21: Séries temporais de excitação e resposta em função do tempo para 2 frequências externas

É importante observar a diferença no tempo entre os gráficos acima, é natural que isto ocorra já que, a análise foi padronizada em função da quantidade de ciclos de batimentos que se deseja obter. De tal sorte que o tempo não será uma variável fixa, pois cada combinação de ω_1 e ω_2 resulta em uma frequência de batimento ω_B diferente, fazendo com que seja necessário variar o tempo para capturar sempre o mesmo número de ciclos de batimento.

Abaixo, na figura 4.22, existem quatro curvas de histerese para diferentes valores de ω_B de interesse. É possível observar que, em cada gráfico, existe um gráfico menor para comparação que representa o caso mais trivial onde $\omega_1 = \omega_2$, neste caso não existe batimento e a curva de histerese é uma elipse perfeita. É interessante observar que nos casos onde ω_1 e ω_2 estão mais próximos existe uma formação maior de elipses intermediárias que ficam dentro de uma elipse maior.

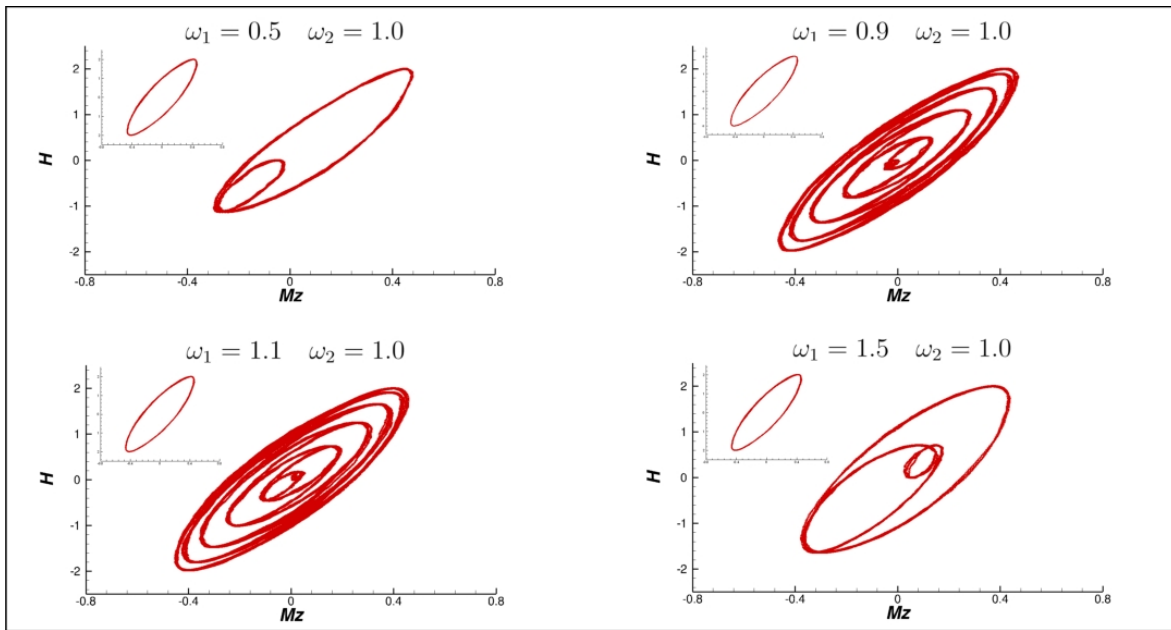
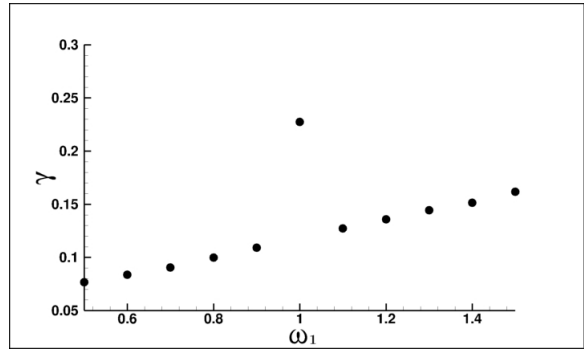
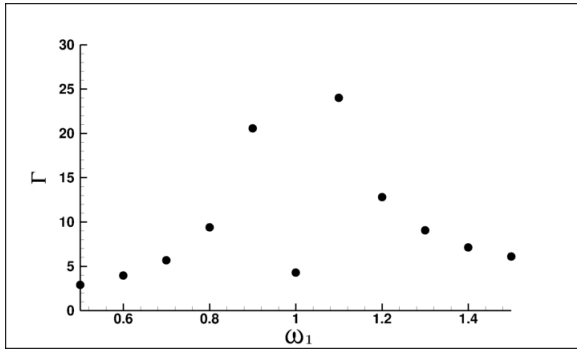


Figura 4.22: Curvas de histerese para diferentes frequências de batimento

A figura 4.23(a) mostra o cálculo numérico das áreas nas curvas de histerese para cada valor de ω_1 , uma vez que ω_2 é fixo e unitário. Analisando a figura, é possível perceber uma tendência de crescimento até $\omega_1 = 0.9$, uma queda abrupta em $\omega_1 = 1$, seguida por uma tendência de decrescimento de $\omega_1 = 1.1$ até $\omega_1 = 1.5$. Entretanto, este gráfico é pouco conclusivo, uma vez as simulações possuem um tempo significativamente diferente, pois a normalização foi feita em função do número de ciclos desejados para cada frequência de batimento. Logo, é evidente que frequências de batimento menores tiveram um tempo de simulação maior.

Diante deste fato, foi considerado mais adequado analisar os valores de integral de HdM em uma média temporal, ou seja, dividindo todos os valores mostrados na figura 4.23(b) pelos seus respectivos tempos de simulação, obtendo uma taxa temporal média da dissipação energética para cada caso simulado. A partir deste raciocínio, a curva 4.23(b) foi traçada. Analisando esta curva, é possível perceber um comportamento semelhante ao obtido para o caso de apenas uma frequência, um aumento quase linear com o aumento de ω_1 . No entanto, existe um caso de destaque muito importante, quando $\omega_1 = 1$ existe um pico significativo de dissipação de energia por tempo, que ocorre, muito provavelmente, pela perfeita superposição das duas ondas que leva a máxima dissipação energética média possível.



(a) Integral de HdM (Γ) em função dos valores de ω_1

(b) Média temporal da integral de HdM (γ) em função dos valores de ω_1

Figura 4.23: Dissipação de energia em termos de Γ e γ em função de ω_1

1

Seria interessante, para nossa análise, entender qual é o impacto da utilização de duas frequências de excitação em relação a excitação com frequência única. Para isso, a curva representada em 4.24 foi traçada, é possível perceber que os valores de dissipação de energia em geral foram maiores quando mantivemos, além da frequência ω_1 , uma frequência $\omega_2 = 1$ fixada, caso que é representado no gráfico pela curva em vermelho. É notório o caso, em que $\omega_1 = \omega_2 = 1$, que retorna um pico na dissipação de energia e a torna muito maior que no caso em que existe apenas uma frequência, isso também é evidente na figure 4.25 que mostra a temperatura no centro do tumor em função da frequência variável ω_1 . Assim, conclui-se que é desejável utilizar duas frequências se o objetivo for maximizar a dissipação de energia mantendo os demais parâmetros constantes. Além da possibilidade de maximização, é possível também utilizar a presença de um segundo campo como fator de controle do nível de aquecimento da região em que o ferrofluido se encontram, ou seja, quando se deseja aumentar a taxa de aquecimento de forma significativa, é possível adicionar uma segunda frequência e desativá-la quando for necessário reduzir esta taxa novamente.

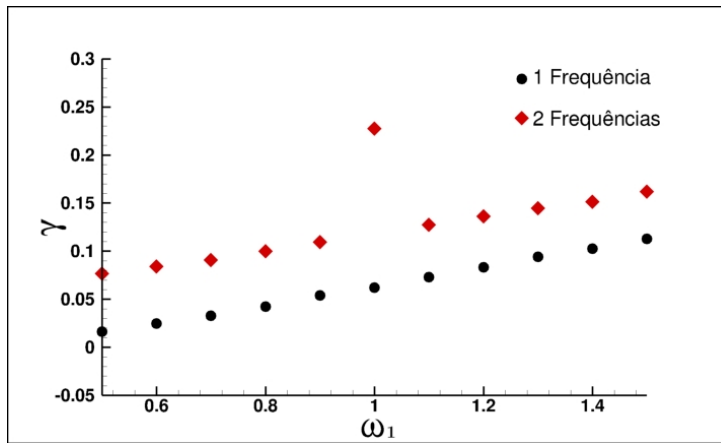


Figura 4.24: Comparação entre o valor de γ para 1 e 2 frequências de excitação, parâmetros usados em ambos os casos: $\phi = 0.05$, $\alpha = 1$, $Pe = 1$, $\lambda = 1$. A curva em preto representa o caso de frequência de excitação única e a curva vermelha mostra o caso em que duas frequências são utilizadas.

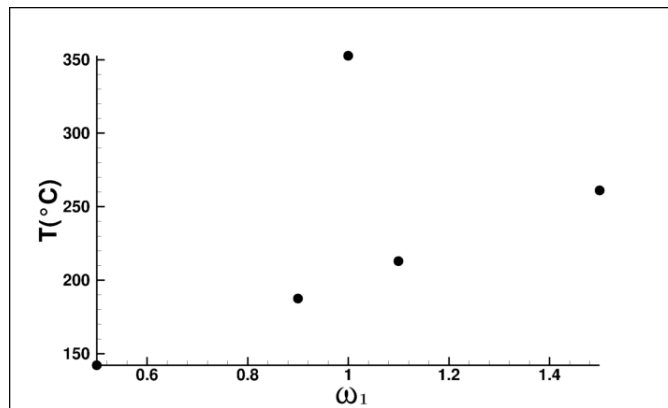


Figura 4.25: Variação da temperatura no centro do tumor em função da frequência variável

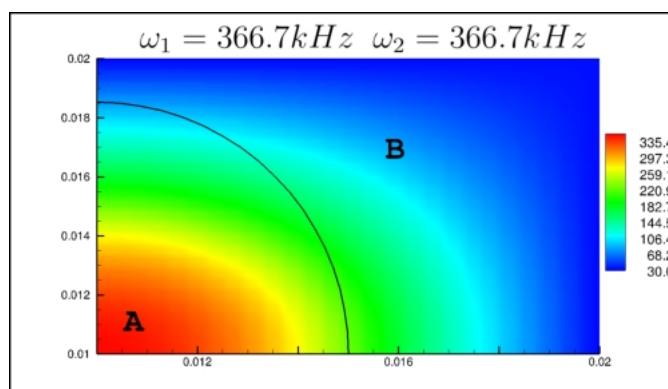


Figura 4.26: Campo de temperatura no caso de duas frequências externas iguais

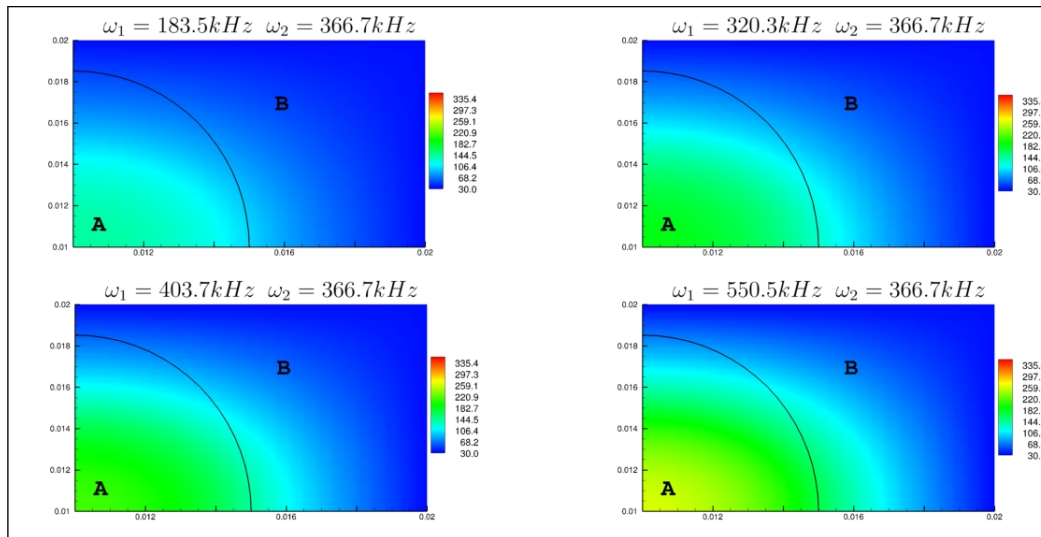


Figura 4.27: Campos de temperatura gerados a partir de diferentes frequências

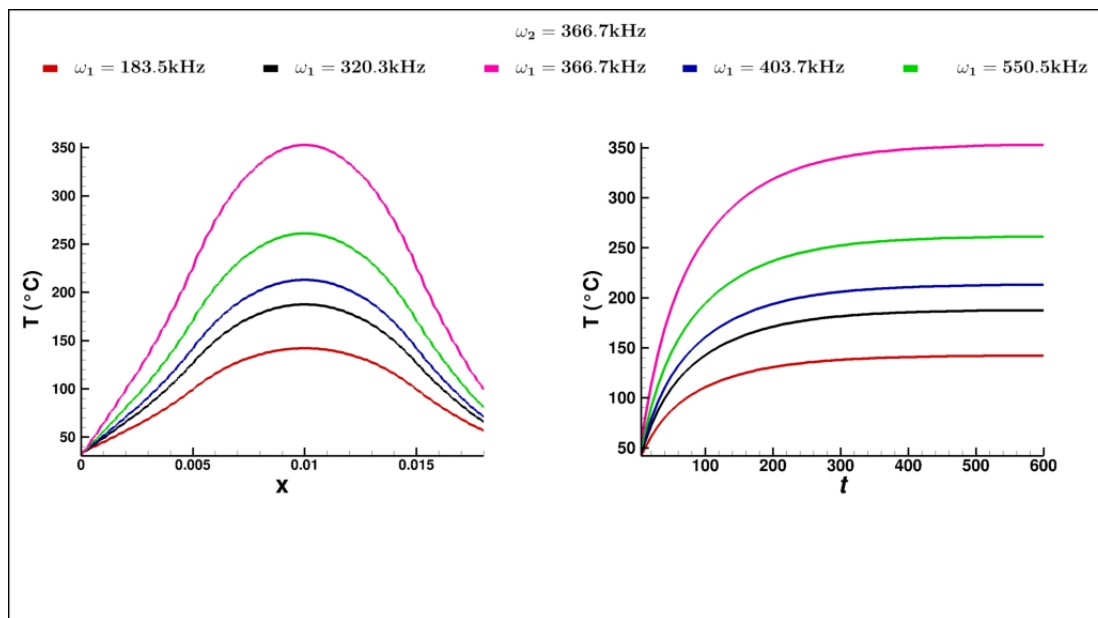


Figura 4.28: Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo

O campos de temperatura para esta bateria estão em conformidade com o comportamento das baterias anteriores, é notado um aumento de temperatura no tumor em função do aumento de frequência de campo externo. No entanto, é interessante notar que existe um aumento significativo na temperatura da região tumoral no caso em que $\omega_1 = \omega_2$, justamente pelo fato dessa combinação de frequências produzir apenas interferências construtivas e levarem a um pico na dissipação de energia, como visto na figura 4.23. Na figura 4.28, é possível ter uma melhor noção gráfica do quanto a temperatura é maior neste pico de dissipação em relação às outras combinações de frequência que produzem o efeito de batimento.

É conveniente comparar também as temperaturas obtidas com dois campos externos de igual valor com aquela obtida utilizando apenas um campo externo. Na figura 4.29, é possível ter uma noção da capacidade de amplificação do efeito de aquecimento mediante aplicação de um segundo campo de mesma intensidade. A imagem 4.30 complementa a análise mostrando um grande aumento de temperatura ao longo da reta r definida previamente, o gráfico à direita mostra que a temperatura máxima atingida no caso de frequência única está na faixa dos $100^{\circ}C$ e no caso de duas frequências esta temperatura atinge a faixa dos $350^{\circ}C$. Esse resultado mostra um grande potencial de aquecimento que o uso de uma segunda frequência de excitação nos fornece, entretanto, é necessário que se tenha cuidado com o seu uso para a aplicação de tratamento de tumores, por exemplo, uma vez que o tecido saudável também possui uma temperatura limite de sobrevivência. No entanto, ao se imaginar as implicações desta descoberta em outras aplicações de magnetohipertermia, percebe-se uma possibilidade muito interessante de se atingir temperaturas muito mais altas combinando campos de mesma frequência. Essa possibilidade tender a ser muito mais atraente do ponto de vista prático, uma vez que a frequência geralmente é um fator limitante, tendo em vista que não é possível aumentá-la de indefinidamente.

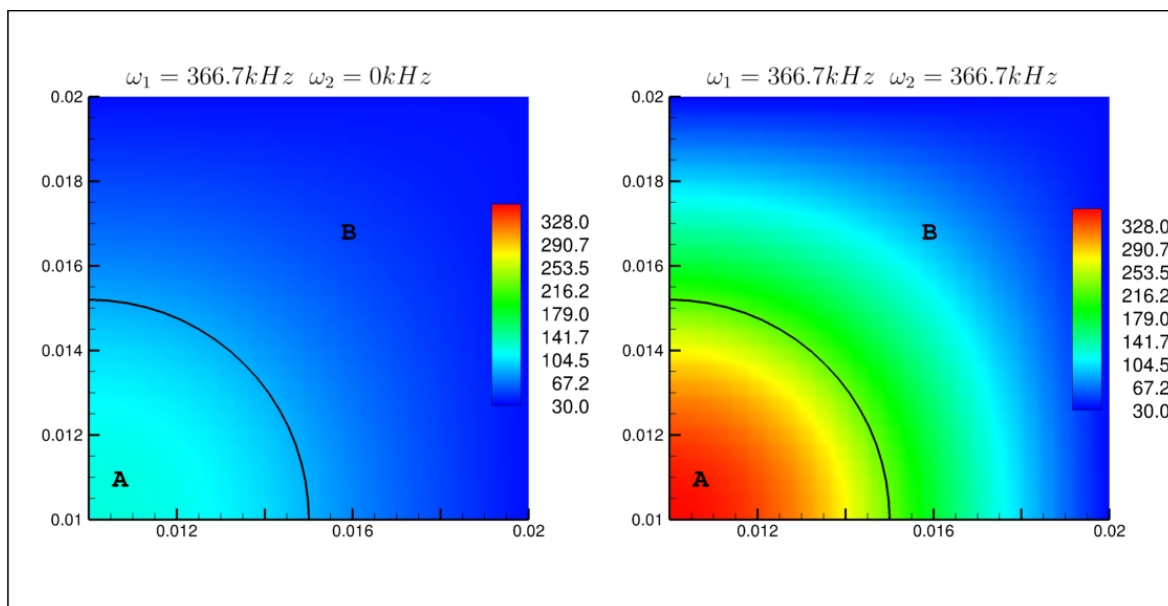


Figura 4.29: Campos de temperatura, comparação entre frequência única e dupla ($\omega_1 = 366.7kHz \ \phi = 0.05 \ \lambda = 1$)

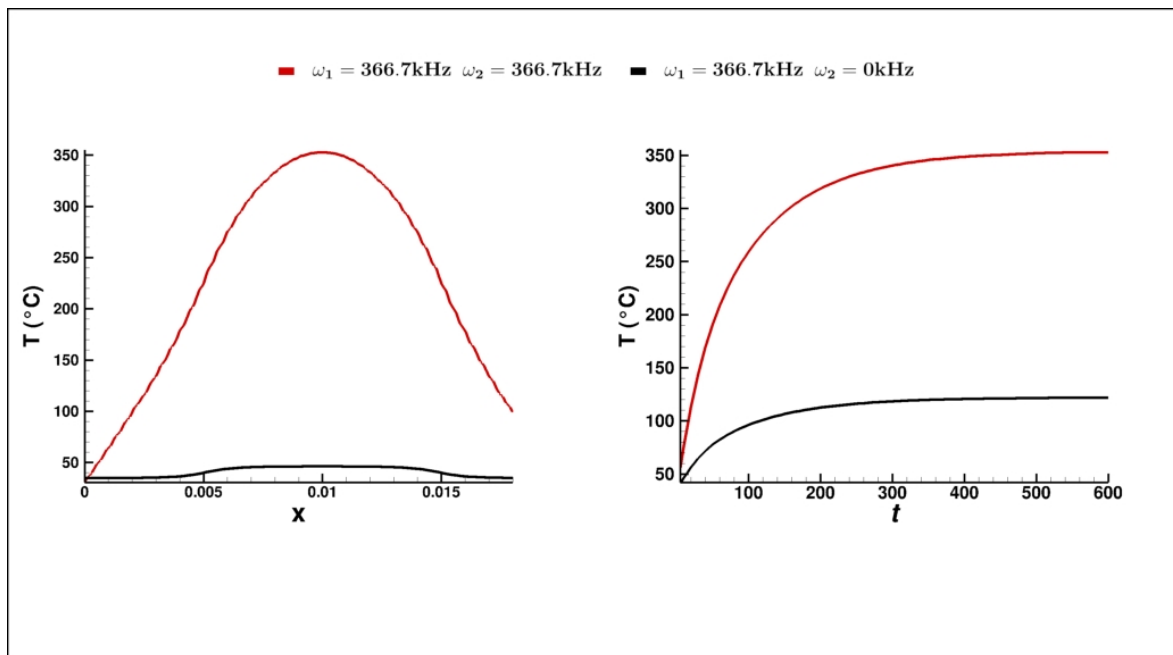


Figura 4.30: Perfis de temperatura ao longo de uma linha reta e evolução temporal ao longo do tempo, comparação entre frequência única e dupla.

Conclusão

Neste trabalho, foi apresentado um estudo sobre as diferentes possibilidades de excitação de um ferrofluido e seus respectivos resultados de dissipação de energia em um contexto de magnetohipertermia. Para tal análise foi utilizado um código de simulação de muitos corpos para mimetizar o comportamento das partículas presentes no fluido magnético, esta ferramenta foi validada em estudos anteriores mostrando resultados compatíveis com os previstos pela teoria analítica já desenvolvida neste campo de estudo.

Para casos de campo com apenas uma frequência de excitação externa, foi observado que um aumento na concentração de partículas magnéticas (ϕ) induz um aumento na taxa de dissipação de energia, principalmente em frequências mais baixas. No entanto, em frequências mais altas, estas taxas tendem a se aproximar se o mesmo valor de λ for mantido. Também foi evidenciado que um aumento no parâmetro λ , em simulações de mesmo ϕ , parece ser responsável por diminuir a taxa de dissipação de energia do ferrofluido, uma explicação plausível é que a interação mais relevante entre partículas atrapalhe a interação com o próprio campo externo. No entanto, concluiu-se que são necessários mais estudos sobre a convergência numérica destes resultados. Em casos de campo com dupla frequência, foi verificado que a adição de uma segunda frequência, de valor próximo ao da primeira frequência utilizada, provoca um aumento na dissipação de energia. Além disso, é interessante destacar que um aumento muito expressivo é visto quando estas duas frequências possuem o mesmo valor, neste caso, as ondas provenientes destas excitações estarão em perfeita concordância e os efeitos dissipativos serão maximizados.

Para análises futuras, são sugeridas análises sobre o efeito da alteração do parâmetro λ em um contexto de dupla frequência de excitação para compreender como este parâmetro influencia a dissipação de energia em um contexto distinto do que já foi analisado. Além disso, também é proposto que sejam realizadas as transformadas rápidas de Fourier (FFT) nas séries temporais de campo e resposta para avaliar melhor quais são as frequências dominantes em cada uma das simulações e se existe alguma escala de tempo adicional que se manifesta de forma mais intensa em algum contexto específico. Esta técnica não foi empregada no presente trabalho pois a discretização das simulações não estava adequada para a sua aplicação e o custo computacional das simulações inviabilizava refazer as análises.

Apêndice

Em contextos mais simples de magnetohipertermia, como regimes mais diluídos e com apenas uma frequência externa aplicada, é possível relacionar a dissipação de energia interna no ferrofluido com uma grandeza física chamada de susceptibilidade complexa. Dentro desta quantidade, existem duas parcelas de natureza matemática distinta: uma parcela real (indicando o armazenamento da energia vinda do campo magnético externo pelo ferrofluido) e uma parcela imaginária (indicando a dissipação desta energia e posterior geração de calor). Então, a susceptibilidade complexa de um fluido magnética será da forma:

$$\chi^*(\omega) = \chi'(\omega) - i\chi''(\omega) \quad (4.3)$$

É interessante mencionar, para enriquecimento do entendimento físico do problema e para compreensão de sua interdisciplinaridade, que mecanismos físicos de natureza semelhante podem ser observados em diferentes contextos da mecânica dos fluidos. No estudo de fluidos não newtonianos com memória, é possível determinar as propriedades viscoelásticas por meio da aplicação de esforços cisalhantes oscilatórios de pequena amplitude [Pereira 2019].

No contexto supracitado, a viscoelasticidade linear também pode ser descrita em termo de uma viscoelasticidade complexa da forma $\eta^*(\omega) = \eta'(\omega) - i\eta''(\omega)$. Aqui, a parcela real é chamada de viscosidade dinâmica e está relacionada também a efeitos dissipativos. A parte imaginária, por sua vez, está atrelada aos efeitos elásticos do problema [Pereira 2019].

Para compreender a relação entre susceptibilidade complexa e a dissipação energética em um ferrofluido, é necessário retornar à equação 2.31 e realizar o processo de integração por partes. Realizando a integração por partes,

$$\oint_c \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} = \mu_0 \left[\mathbf{H} \cdot \mathbf{M} \Big|_1^2 - \oint_c \mu_0 \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H} \right] \quad (4.4)$$

No entanto, $H(t)$ e $M(t)$ são funções harmônicas com defasagem constante e 1 e 2 representam pontos separados por um intervalo de um período no ciclo temporal. Sendo assim, é

possível afirmar que $\mathbf{H} \cdot \mathbf{M}\Big|_1 = \mathbf{H} \cdot \mathbf{M}\Big|_2$. Desta forma, se já assumirmos que \mathbf{H} e \mathbf{M} são paralelos, temos:

$$du = -\mu_0 \oint_c \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H} \quad (4.5)$$

$$\Delta U = - \oint_c \mu_0 \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H} \quad (4.6)$$

Assim, quando a magnetização está atrasada em relação ao campo, existe uma conversão de trabalho magnético em energia interna no material.

Considere agora, a aplicação de um campo $H(t)$ do tipo $H(t) = H_0 \cos(\omega t)$. Analisando a identidade de Euler, exposta em 4.7, é evidente que $\cos(\omega t) = \text{Re}(e^{i\omega t})$. Portanto, o campo $H(t)$ pode ser reescrito como $H(t) = \text{Re}(H_0 e^{i\omega t})$.

$$e^{i\omega t} = \cos(\omega t) + i \text{sen}(\omega t) \quad (4.7)$$

É possível, ainda, assumir que:

$$M(t) = \text{Re}(\chi^* H_0 e^{i\omega t}) \quad (4.8)$$

Utilizando a expressão 4.3 em 4.8, é possível chegar na expressão:

$$M(\chi) = \text{Re} \left[\chi' H_0 e^{i\omega t} - i \chi'' H_0 e^{i\omega t} \right] \quad (4.9)$$

Desenvolvendo,

$$M(\chi) = \text{Re} \left[\chi' H_0 \cos(\omega t) + \chi' H_0 i \text{sen}(\omega t) - i \chi'' H_0 \cos(\omega t) + \chi'' H_0 \text{sen}(\omega t) \right] \quad (4.10)$$

$$M(\chi) = \chi' H_0 \cos(\omega t) + \chi'' H_0 \text{sen}(\omega t) \quad (4.11)$$

Por fim, é possível obter a seguinte expressão para $M(\chi)$:

$$M(\chi) = H_0 \left[\chi' \cos(\omega t) + \chi'' \text{sen}(\omega t) \right] \quad (4.12)$$

A equação 4.12 mostra a existência de uma parte real, que ilustra a resposta em fase com a excitação, e uma parte imaginária, que representa a componente fora de fase.

Deseja-se agora obter uma expressão para o cálculo de du , sabendo que esta grandeza pode ser escrita da forma representada em 4.5, será considerada a resolução desta integral

dentro de um período, assim:

$$du = -\mu_0 \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M \cdot dH \quad (4.13)$$

Sendo que é possível calcular $\frac{dH}{dt}$ e chegar à:

$$dH = -H_0 \omega \text{sen}(\omega t) dt \quad (4.14)$$

Assim, usando 4.14 em 4.13, a expressão resultante será:

$$du = -\mu_0 H_0^2 \omega \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \left[\chi' H_0 \cos(\omega t) \text{sen}(\omega t) + \chi'' H_0 \text{sen}^2(\omega t) \right] dt \quad (4.15)$$

Desenvolvendo 4.15, a expressão final será:

$$du = \mu_0 \pi H_0^2 \chi'' \quad (4.16)$$

Então, a taxa de variação em um ciclo seria fornecida por:

$$\frac{\Delta u}{\Delta t} = \frac{\mu_0 \pi H_0^2 \chi''}{f^{-1}} = \mu_0 \pi H_0^2 f \chi'' \quad (4.17)$$

Onde $f = \frac{\omega}{2\pi}$ e é dado em Hz.

4.2.2 Formulação para χ''

Neste momento, para avançar na formulação do problema, é necessário obter um modelo para χ'' . Na literatura existente sobre magnetohipertermia, não há um consenso em relação a modelagem de M , que representa o termo de magnetização. No presente trabalho, para que se consiga um modelo de χ'' será considerado o seguinte modelo de magnetização proposto por Shliomis [Shliomis et al. 1971]:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{1}{\tau} (M_0 - M) \quad (4.18)$$

Onde τ é o tempo de relaxação magnética, $M_0 = M_0(t)$ e $M = M(t)$. Considerando ainda que:

$$M_0(t) = \chi_0 H_0 \cos(\omega t) \quad (4.19)$$

Em que χ_0 é a susceptibilidade de equilíbrio.

Usando 4.19 e 4.12 em 4.18, chega-se à:

$$-H_0\omega\chi' \text{sen}(\omega t) + H_0\omega\chi'' \text{cos}(\omega t) = \frac{\chi_0 H_0 \text{cos}(\omega t)}{\tau} - \frac{\chi' H_0 \text{cos}(\omega t)}{\tau} + \frac{\chi'' H_0 \text{sen}(\omega t)}{\tau} \quad (4.20)$$

É possível reorganizar a equação 4.20 e obter:

$$\text{cos}(\omega t) \left(\omega\chi'' - \frac{\chi_0}{\tau} + \frac{\chi'}{\tau} \right) + \text{sen}(\omega t) \left(\frac{\chi''}{\tau} - \omega\chi' \right) = 0 \quad (4.21)$$

Para que a equação 4.21 seja válida, desconsiderando a solução trivial, é necessário que:

$$\frac{\chi''}{\tau} - \omega\chi' = 0 \quad (4.22)$$

$$\chi'' = \omega\tau\chi' \quad (4.23)$$

E também segue que:

$$\omega\chi'' - \frac{\chi_0}{\tau} + \frac{\chi'}{\tau} = 0 \quad (4.24)$$

Usando 4.23 em 4.24, é possível chegar na expressão 4.28.

$$\omega^2\tau\chi' - \frac{\chi_0}{\tau} + \frac{\chi'}{\tau} = 0 \quad (4.25)$$

$$\chi' \left(\frac{1}{\tau} + \omega^2\tau \right) = \frac{\chi_0}{\tau} \quad (4.26)$$

$$\chi' \left(\frac{1 + \omega^2\tau^2}{\tau} \right) = \frac{\chi_0}{\tau} \quad (4.27)$$

$$\chi' = \frac{\chi_0}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (4.28)$$

Substituindo 4.28 em 4.23, obtém-se a expressão 4.29:

$$\chi'' = \left[\frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \right] \chi_0 \quad (4.29)$$

4.2.3 Análise das escalas de tempo

Agora, é importante definir as escalas de tempo do problema, elas serão muito importantes para compreender a física do problema, a escala de tempo τ do problema pode ser dada pela seguinte expressão:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_N} + \frac{1}{\tau_B} \quad (4.30)$$

Onde τ_N é a escala de tempo de Néel, que está relacionada ao escorregamento existente entre o movimento da nanopartícula e o movimento dipolo à ela correspondente. Tal escorregamento é dependente do tamanho da partícula, no presente estudo, o tamanho das partículas permite assumir que a dinâmica será dominada pelo movimento browniano.

O parâmetro τ_B é a escala de tempo relacionada ao movimento browniano das partículas, também influenciado pelas suas dimensões. As expressões que descrevem ambos os parâmetros podem ser vistas nas equações 4.31 e 4.32.

$$\tau_N = \left[\frac{\pi}{2} \frac{e^{\frac{AV_m}{K_B T}}}{\sqrt{\frac{AV_m}{K_B T}}} \right] \tau_0 \quad (4.31)$$

$$\tau_B = \frac{3\eta V_H}{K_B T} \quad (4.32)$$

Onde A é a constante de anisotropia magnética, uma propriedade que depende do material das partículas. V_H é o volume hidrodinâmico das partículas magnéticas.

Uma expressão para o cálculo de V_H pode ser obtida por meio de uma análise da figura 4.31, que representa uma partícula magnética com as moléculas de surfactante aderidas à sua superfície. É possível verificar que o volume hidrodinâmico (volume total ocupado pela partícula) precisa levar em conta o diâmetro da própria partícula somado à dimensão da camada de surfactante em cada molécula deste componente, denotada na figura por δ . Desta forma, o diâmetro hidrodinâmico da partícula será $D_H = D_M + 2\delta$ e o seu volume, utilizando a aproximação do volume de uma esfera, será dado por $V_H = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{D_H}{2}\right)^3$.

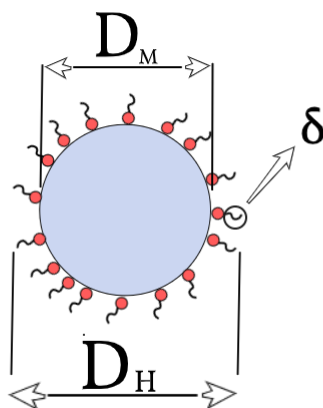


Figura 4.31: Partícula magnética envolvida por uma camada de surfactante

Também é necessário compreender melhor a grandeza χ_0 , este valor de susceptibilidade é dependente do campo magnético e pode ser escrito em termos de uma função Langevin

$(\mathcal{L}(x) = \coth x - \frac{1}{x})$ que tem como parâmetro o valor α que é calculado por uma expressão da forma:

$$\alpha = \frac{\mu_0 M_d H_0 V_m}{K_B T}$$

Assim, χ_0 será dado pela expressão 4.33.

$$\chi_0 = 3 \frac{\chi_i}{\alpha} \mathcal{L}(\alpha) \quad (4.33)$$

Onde

$$\chi_i = \frac{\mu_0 \Phi M_d^2 V_m}{3 K_B T}$$

Assim, é possível conceber que:

$$\frac{3\chi_i}{\alpha} = \frac{\Phi M_d}{H_0} = \frac{M_S}{H_0} = \chi_S \quad (4.34)$$

Por fim, é possível escrever que:

$$\chi_0 = \chi_S \mathcal{L}(\alpha) \quad (4.35)$$

É importante salientar que o modelo proposto pela expressão 4.35 não considera o efeito da interação entre as partículas.

Existe ainda um modelo mais interessante para o parâmetro X_0 que pode ser explorado em análises futuras. Este modelo é mostrado na expressão 4.36.

$$\chi_0 = \chi_S \{ \mathcal{L}(\alpha) + \lambda \phi E(\alpha) + \lambda^2 \Phi^2 [F(\alpha) + G(\alpha)] \} \quad (4.36)$$

Onde as funções $E(\alpha)$, $F(\alpha)$ e $G(\alpha)$ são dadas por:

$$E(\alpha) = \frac{\pi}{3} \left(\frac{24}{\alpha} \right) \mathcal{L}(\alpha) \left[\frac{1}{\alpha} - \alpha \operatorname{cosech}^2(\alpha) \right] \quad (4.37)$$

$$F(\alpha) = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{3} \right)^2 \left(\frac{24}{\alpha} \right)^2 \mathcal{L}^2(\alpha) \left[2\alpha^2 \operatorname{cosech}^2(\alpha) \coth(\alpha) - \frac{2}{\alpha} \right] \quad (4.38)$$

$$G(\alpha) = \frac{\pi^2}{144} \left(\frac{24}{\alpha} \right)^2 \mathcal{L}(\alpha) \left[\frac{1}{\alpha} - \alpha \operatorname{cosech}^2(\alpha) \right]^2 \quad (4.39)$$

Sendo que:

$$\lambda = \frac{\mu_0 M_d^2 \pi D_m^3}{36 K_B T}$$

Referências Bibliográficas

- [Beenakker 2005] Beenakker, C. W. J. (2005). Ewald sum of the rotne-prager tensor. *J. Chem. Phys.*, 85:1581–1582.
- [Berkov et al. 2006] Berkov, D., Gorn, N., Schmitz, R., and Stock, D. (2006). Langevin dynamic simulations of fast remagnetization processes in ferrofluids with internal magnetic degrees of freedom. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 18(38):S2595.
- [Berkov et al. 2009] Berkov, D., Iskakova, L. Y., and Zubarev, A. Y. (2009). Theoretical study of the magnetization dynamics of nondilute ferrofluids. *Physical Review E*, 79(2):021407.
- [Berkov and Gorn 2001] Berkov, D. V. and Gorn, N. L. (2001). Susceptibility of the disordered system of fine magnetic particles: a langevin-dynamics study. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 13:9369–9381.
- [Bottenberg et al. 1980] Bottenberg, W., Melillo, L., and Raj, K. (1980). the dependence of loudspeaker design parameters on the properties of magnetic fluids. *journal of the audio engineering society*, 28(1/2):17–25.
- [Ewald 1921] Ewald, P. P. (1921). Die berechnung optischer und elektrostatischer gitterpotentiale,. *Ann. Phys.*, 64:253–287.
- [Gontijo and Cunha 2015a] Gontijo, R. and Cunha, F. (2015a). Dynamic numerical simulations of magnetically interacting suspensions in creeping flow. *Powder Technol.*, 279:146–165.
- [Gontijo and Cunha 2015b] Gontijo, R. and Cunha, F. (2015b). Dynamic numerical simulations of magnetically interacting suspensions in creeping flow. *Powder Technol.*, 279:146–165.
- [Gontijo and Guimarães 2023] Gontijo, R. and Guimarães, A. (2023). Effect of interparticle correlation on magnetic hyperthermia in biological media: A numerical study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 580:170931.
- [Gontijo and Cunha 2017a] Gontijo, R. G. and Cunha, F. R. (2017a). Numerical simulations of magnetic suspensions with hydrodynamic and dipole-dipole magnetic interactions. *Phys. Fluids*, 29:062004.

- [Gontijo and Cunha 2017b] Gontijo, R. G. and Cunha, F. R. (2017b). Numerical simulations of magnetic suspensions with hydrodynamic and dipole-dipole magnetic interactions. *Phys. Fluids*, 29:062004.
- [Gontijo and Guimarães] Gontijo, R. G. and Guimarães, A. B. Langevin dynamic simulations of magnetic hyperthermia in rotating fields. *MAGMA-D-22-01084*.
- [Guedes et al. 2004] Guedes, M., Guedes, M., Morais, P., Da Silva, M., Santos, T., Alves Jr, J., Bertelli, C., Azevedo, R., and Lacava, Z. (2004). Proposal of a magnetohyperthermia system: preliminary biological tests. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 272:2406–2407.
- [Guimarães et al. 2020] Guimarães, A., Cunha, F., and Gontijo, R. (2020). The influence of hydrodynamic effects on the complex susceptibility response of magnetic fluids undergoing oscillatory fields: New insights for magnetic hyperthermia. *Physics of Fluids*, 32(1):012008.
- [Guimaraes et al. 2020] Guimaraes, A. B., Cunha, F. R., and Gontijo, R. G. (2020). The influence of hydrodynamic effects on the complex susceptibility response of magnetic fluids undergoing oscillatory fields: New insights for magnetic hyperthermia. *Phys. Fluids*, 32:012008.
- [Ilg and Odenbach 2009] Ilg, P. and Odenbach, S. (2009). *Ferrofluid Structure and Rheology*. Lecture Notes in Physics. Springer.
- [Klausen 2008] Klausen, M. (2008). Paramagnetic fluids optimization of the chemical synthesis of magnetite ferrofluids. *Young Scientists Journal*, 1(6):6.
- [Kodama 2017] Kodama, S. (2017). *Morpho Towers - Two Standings Spirals*. Artjaws Collections.
- [Kole and Dey 2011] Kole, M. and Dey, T. (2011). Role of interfacial layer and clustering on the effective thermal conductivity of cuo–gear oil nanofluids. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 35(7):1490–1495.
- [Kole and Dey 2010] Kole, M. and Dey, T. K. (2010). Thermal conductivity and viscosity of alsub2/subosub3/subnanofluid based on car engine coolant. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 43(31):315501.
- [Kole and Khandekar 2021] Kole, M. and Khandekar, S. (2021). Engineering applications of ferrofluids: A review. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 537:168222.
- [Lemine 2019] Lemine, O. (2019). Magnetic hyperthermia therapy using hybrid magnetic nanostructures. In *Hybrid nanostructures for cancer theranostics*, pages 125–138. Elsevier.

- [McQuarrie 2000] McQuarrie, D. A. (2000). *Statistical Mechanics*. University Sciences Books, Sausalito.
- [Nussenzveig 2018] Nussenzveig, H. (2018). *Curso de física básica: Fluidos, oscilações e ondas, calor*. Curso de física básica. Editora Blucher.
- [Pereira 2019] Pereira, I. D. O. (2019). Rheology of ferrofluids in shear flows.
- [Philip et al. 2007] Philip, J., Shima, P., and Raj, B. (2007). Enhancement of thermal conductivity in magnetite based nanofluid due to chainlike structures. *Applied physics letters*, 91(20):203108.
- [Philip et al. 2008] Philip, J., Shima, P., and Raj, B. (2008). Evidence for enhanced thermal conduction through percolating structures in nanofluids. *Nanotechnology*, 19(30):305706.
- [Rosa et al. 2017] Rosa, A. P., Abade, G. C., and Cunha, F. R. (2017). Computer simulations of equilibrium magnetization and microstructure in magnetic fluids. *Phys. Fluids*, 29:092006.
- [Rosensweig 2013] Rosensweig, R. E. (2013). *Ferrohydrodynamics*. Courier Corporation.
- [Salloum et al. 2008] Salloum, M., Ma, R., and Zhu, L. (2008). An in-vivo experimental study of temperature elevations in animal tissue during magnetic nanoparticle hyperthermia. *International Journal of Hyperthermia*, 24(7):589–601.
- [Shliomis et al. 1971] Shliomis, M. et al. (1971). Effective viscosity of magnetic suspensions. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 61(2411):s1971d–1971.
- [Silva et al. 2012] Silva, A. C. d., Cabral, F. R., Mamani, J. B., Malheiros, J. M., Polli, R. S., Tannus, A., Vidoto, E., Martins, M. J., Sibov, T. T., Pavon, L. F., et al. (2012). Monitoramento por imagem de ressonância magnética do crescimento tumoral no modelo c6 de glioblastoma com perspectivas de avaliação da terapia de magnetohipertermia. *Einstein (São Paulo)*, 10:11–15.
- [Stratton 1941] Stratton, J. A. (1941). *Electromagnetic theory*, mcgrow-hill book company. Inc., New York, and London, pages 205–207.
- [Wang et al. 2019] Wang, J., Li, G., Zhu, H., Luo, J., and Sundén, B. (2019). Experimental investigation on convective heat transfer of ferrofluids inside a pipe under various magnet orientations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 132:407–419.
- [Wust et al. 2002] Wust, P., Hildebrandt, B., Sreenivasa, G., Rau, B., Gellermann, J., Riess, H., Felix, R., and Schlag, P. (2002). Hyperthermia in combined treatment of cancer. *The lancet oncology*, 3(8):487–497.
- [Zubarev et al. 2005] Zubarev, A., Fleischer, J., and Odenbach, S. (2005). Towards a theory of dynamical properties of polydisperse magnetic fluids: Effect of chain-like aggregates. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 358(2):475–491.