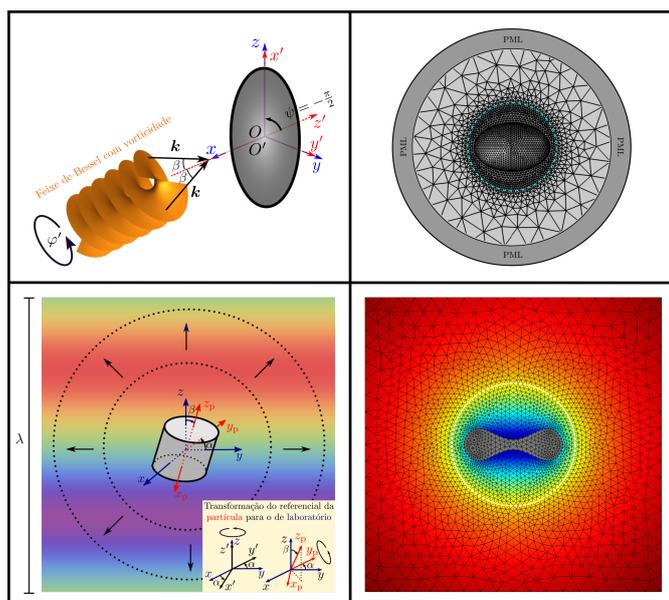




UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

EVERTON BRITO DE LIMA

APLICAÇÕES DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS NA
OBTENÇÃO DA FORÇA E TORQUE DE RADIAÇÃO ACÚSTICA EM
PARTÍCULAS ANISOTRÓPICAS



MACEIÓ - BRASIL
ABRIL - 2023

Everton Brito de Lima

APLICAÇÕES DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS NA
OBTENÇÃO DA FORÇA E TORQUE DE RADIAÇÃO ACÚSTICA EM
PARTÍCULAS ANISOTRÓPICAS

Tese apresentada no instituto de Física da
Universidade Federal de Alagoas - Ufal, como
requisito necessário para obtenção do título
de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. José Henrique Araújo Lopes de Andrade
Coorientador: Prof. Dr. Glauber José Ferreira Tomaz da Silva

MACEIÓ - BRASIL
ABRIL - 2023

INSTITUTO DE FÍSICA - UFAL

Catlogação na Fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 - 1767

L732a Lima, Everton Brito de.
Aplicações do método de elementos finitos na obtenção da força e torque de radiação acústica em partículas anisotrópicas / Everton Brito de Lima. – 2023.
[135] f. : il.

Orientador: José Henrique Araújo Lopes de Andrade.
Coorientador: Glauber José Ferreira Tomaz da Silva

Tese (doutorado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2023.

Bibliografia: f. 89-96.
Apêndices: f. 97-[135].

1. Método de elementos finitos. 2. Força e torque de radiação acústica. 3. Manipulação de micropartículas. I. Título

CDU: 531-142.36

*Dedico esta tese ao meu avô
Heleno Gonçalves de Lima,
in memoriam, por seu sonho
de ver algum descendente seu
formado.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por seu suporte de ordem superior, sem o qual eu não teria conseguido prosseguir diante das tantas adversidades desse percurso.

Agradeço aos meus pais Everaldo Gonçalves e Sandra Valéria, pela educação, princípios e carinho que deram, que me serviram e servirão por toda a vida. Aos meus irmãos Allison Gustavo e Samara Lorrany, por toda confiança e carinho que depositam em mim. À minha amada companheira Érica Melo por todo apoio e cuidado, sempre compartilhando minhas angústias e preocupações (nos bastidores, até parou um carro de som que passava na rua e vizinhos com som alto que iriam atrapalhar a defesa desta tese rrsrs). Aos meus avôs, *in memoriam*, Severino e Oscar Bila, às avós Helena, Elizabete e Glória, a todas (sem exceção) tias, tios, primas e primos, que sempre torceram e acreditaram no meu potencial. Em especial, gostaria de dedicar esta tese ao meu avô Heleno Gonçalves de Lima, que sempre teve o sonho de ver um de seus descendentes formado. Embora ele não esteja mais conosco, espero que essa conquista lhe traga orgulho e saiba que seu legado continua vivo em nossa família.

Agradeço ao Ari, por ter me aturado enquanto dividíamos aluguel, a convivência nunca é fácil, mas fortalece laços que podem durar o resto da vida. Aos parceiros de condomínio e de curso, Raul e Giclênio, que assim como Ari, desde o início demonstraram serem verdadeiros amigos de integridade raríssima nos dias de hoje. À Maria Cavalcante, que chegou depois, mas é como se sempre estivesse estado lá, obrigado por todo carinho e cuidado. Aos parceiros de Lab Alisson Marques e Giclênio, não poderia ter melhor companhia para trabalhar, tornando o GAF uma extensão de nossas casas, sempre acolhedor. Agradeço aos parceiros de curso e jogatina Alisson Marques, Alisson Nogueira, Júlio, Ícaro, Vinícius e Dimitri, por todo companheirismo e descontração, essenciais para tornar essa jornada mais leve. Às "meninas da Física" Pam, Lais, Fernanda e Daiane, por seu toque feminino (colocando esse bando de ogros da pós nos trilhos rrsrs), deixando o ambiente da pós bem mais agradável.

Agradeço ao meu orientador Henrique por ter me orientado (e puxado na orelha rrsrs) desde a graduação, foi uma honra e um prazer imenso ter sido seu primeiro orientando de graduação, mestrado e agora doutorado, obrigado por toda parceria e conselhos, dignos de um pai para filho. Ao meu coorientador, sendo um verdadeiro líder do Grupo de Acústica Física (GAF), detentor de um currículo de qualidade inquestionável (uma enciclopédia acústica humana, como falamos nos bastidores rrsrs). Ao Neto que levaria o título de co-coorientador, se assim fosse permitido, além de orientar sempre preza pela precisão física em nossos trabalhos. Agradeço aos demais colaboradores, sem os quais alguns dos trabalhos publicados não teriam sido possíveis. Aos participantes da banca, por terem prontamente aceitado participar da mesma.

Agradeço à Ufal e aos professores do instituto de Física pela formação de excelência, e à Capes pela bolsa e demais financiamentos.

“Nada na vida deve ser temido, apenas compreendido.”
-Marie Curie

Resumo

Os campos acústicos médios de força e torque de radiação acústica, decorrem da interação não linear de uma onda acústica harmônica no tempo com uma partícula. Esses fenômenos são amplamente utilizados em acustofluídica, na manipulação de micropartículas como células e microrganismos. Aqui, destacaremos as contribuições de modelos numéricos desenvolvidos através do método de elementos finitos utilizados, primeiramente, na validação de modelos analíticos de interação não linear com partículas esféricas de subcomprimento de onda, e posteriormente, na composição de um modelo semi-analítico que descreve os campos acústicos médios em uma partícula axissimétrica qualquer. No primeiro trabalho, as expressões analíticas para a força e torque de radiação acústica em um esferoide rígido de subcomprimento de onda são obtidas na aproximação de dipolo do espalhamento, onde a força possui uma componente gradiente e uma componente de espalhamento, enquanto o torque é dado em termos de uma contribuição devido ao momento e outra devido ao spin acústico. Comparamos os resultados numéricos e analíticos, utilizando um campo acústico composto por duas ondas planas com vetores de onda cruzados. Outro trabalho que também abrange o torque de radiação acústica em um esferoide de subcomprimento de onda será apresentado, entretanto com uma abordagem que destaca a relação entre o spin acústico e o torque devido a interação da partícula com um feixe de Bessel de primeira ordem, onde também veremos a comparação entre os resultados analíticos e os numéricos. No trabalho seguinte, foi proposto um método semi-analítico de notável eficiência na obtenção dos campos médios de força e torque de radiação acústica exercidos em qualquer partícula axissimétrica de subcomprimento de onda, imersa em um campo acústico arbitrário. Contornando, tanto as limitações dos métodos analíticos, restringidos a problemas com simetria em relação a um dado sistema de coordenadas, quanto às limitações dos métodos puramente numéricos, que demandam muito tempo e poder computacional para simular o comportamento da partícula ao longo do campo acústico. Neste trabalho, os campos acústicos médios são dados em função de coeficientes de espalhamento referentes aos modos de monopolo e dipolo, os quais são calculados numericamente em uma dada configuração simplista, e depois são utilizados para generalizar os resultados para qualquer campo incidente. Comparamos nosso método com um resultado exato para uma esfera rígida de subcomprimento de onda em água, bem como demonstramos o potencial da nossa metodologia, apresentando um exemplo de aplicação mais realista, utilizando um glóbulo vermelho imerso no plasma sanguíneo sob a atuação de uma onda ultrassônica estacionária.

Palavras-chave: Método de elementos finitos, força e torque de radiação acústica, manipulação de micropartículas.

Abstract

The mean acoustic fields of acoustic radiation torque and force result from the non-linear interaction of a harmonic acoustic wave in time with a particle. These phenomena are widely used in acoustofluidics, in the manipulation of microparticles such as cells and microorganisms. Here we will highlight the contributions of numerical models developed through the finite element method used, firstly, in the validation of analytical models of nonlinear interaction with spheroidal particles of subwavelength, and later, in the composition of a semi-analytical model that describes the fields acoustic averages on any axisymmetric particle. In the first work, the analytical expressions for the force and torque of acoustic radiation on a sub-wavelength rigid spheroid are obtained in the scattering dipole approximation, where the force has a gradient component of a scattering component, while torque is given in terms of a contribution due to momentum and another due to acoustic spin. We compared the numerical and analytical results, using an acoustic field composed of two plane waves with crossed wave vectors.. Another work that also involves the acoustic radiation torque on a subwavelength spheroid will be presented, however with an approach that highlights the relationship between the acoustic spin and the torque due to the interaction of the particle with a first order Bessel beam, where we will also see the comparison between analytical and numerical results. In the following work, a semi-analytical method of remarkable efficiency was proposed in obtaining the means-acoustics radiation force and torque fields exerted on any subwavelength axisymmetric particle, in an ordinary acoustic field. Bypassing both the limitations of analytical methods, restricted to problems with symmetry in relation to a given coordinate system, and the limitations of purely numerical methods, which demand a lot of time and computational power to simulate the behavior of the particle along the acoustic field. In this work, the mean-acoustic fields are given as a function of scattering coefficients referring to the monopole and dipole modes, which are numerically calculated in a given simplistic configuration, and then are used to generalize the results to any incident field. We compare our method with an exact result for a rigid sphere of subwavelength in water, as well as demonstrate the potential of our methodology, presenting a more realistic example of application using a red blood cell immersed in blood plasma under the action of a stationary ultrasonic wave.

Keywords: Finite element method, acoustic radiation force and torque, manipulation of microparticles.

Lista de Figuras

2.1	Ilustração das forças atuando em um elemento de fluido de volume V_0 ocupado por partículas de massa m_i e velocidade v_i	7
2.2	Coordenadas esféricas (r, θ, φ) , onde: r é a distância radial, θ (theta) é o ângulo polar e φ (phi) é o ângulo azimutal; e_r é o vetor unitário na direção radial, e (e_x, e_y, e_z) são os vetores unitários cartesianos.	14
2.3	Representação da deformação de um meio contínuo de volume V_0 e superfície S_0 resultando em um volume V'_0 e superfície S'_0 (desconsiderar o deslocamento lateral, foi ilustrado dessa forma apenas para melhor demonstrar a soma dos vetores, de forma a não aglomerá-los.)	18
2.4	Representação do vetor de tração \mathbf{q} em um meio contínuo de volume V_0 e superfície S_0 devido às forças externas $f_i (i = 1, 2, 3)$	19
3.1	Duas ondas planas cruzadas formando um ângulo reto, interagindo com uma partícula esferoidal no plano $x'z'$ (referencial de laboratório). O referencial da partícula é denotado pelos eixos x, y e z , de modo que a orientação da partícula no plano $x'z'$ é dada por um ângulo α entre os eixos z e z' . Os eixos y e y' estão orientados para dentro do plano de visualização. Os vetores de onda k_1 e k_2 estão representados por setas verdes e vermelhas. E o vetor \mathbf{h} , seta roxa, aponta do centro da partícula para um antinó de pressão transversal.	32
3.2	Amplitude de pressão (parte real) da onda de entrada, dada pela Eq. (3.43a), com a parte positiva sendo denotada em amarelo claro, e a parte negativa em vermelho escuro. A orientação de equilíbrio da partícula esferoidal (elipse cinza) é ilustrada em um nó ($\alpha = 0$) e em um antinó ($\alpha = \pi/2$). As polarizabilidades da velocidade do fluido estão representadas para $h = h_+ = \sqrt{2}\pi/4k$ (spin up) e $h = h_- = -\sqrt{2}\pi/4k$ (spin down).	39
3.3	Interação de uma feixe de Bessel com vorticidade e uma partícula esferoidal. Ambos os sistemas de coordenadas, $O(x, y, z)$ (o sistema da partícula em azul) e $O'(x', y', z')$ (o de laboratório em vermelho), estão centrados no centro geométrico da partícula. O feixe se propaga ao longo de x na direção de $-\infty$ e ao longo de z' na direção de $+\infty$. Através de uma rotação de 90° no sentido anti-horário em torno de y e y' podemos mapear os sistemas de coordenadas, um em relação ao outro.	41

3.4	Velocidade angular estacionária, dada pela Eq. (3.73a), versus o parâmetro geométrico da partícula ξ_0 , para diferentes picos de pressão, com $\beta = \pi/4$. Para a partícula imersa em água, temos $a = 120 \mu\text{m}$ e $f = 1 \text{ MHz}$; e no ar, $a = 680 \mu\text{m}$ e $f = 40 \text{ kHz}$. Obtemos o valor máximo da velocidade angular para $\xi_0 = 1.21(a/b = 1.77)$	44
3.5	Ilustração do problema: Interação de uma onda plana (imagem de fundo com uma crista positiva e um vale negativo em roxo e vermelho, nessa ordem) de comprimento de onda λ com uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda (representada por um cilindro cinza). A orientação da partícula em relação ao referencial de laboratório (eixos em azul) é descrita por dois ângulos de Euler (α, β) . O referencial da partícula é representado pelos eixos em vermelho. As setas e os círculos concêntricos denotam o espalhamento da onda pela partícula. Na inserção do canto inferior direito, apresentamos as rotações elementares que mapeiam um vetor do referencial da partícula (eixos em azul) para o de laboratório (eixos em vermelho).	47
4.1	Demonstração de discretização um domínio com geometria simples (retangular) em 2D.	56
4.2	Demonstração de discretização de um domínio com geometria mais elaborada em 3D.	56
4.3	Demonstração da aplicação de uma função de teste, onde a primeira curva $(T(x))$ é multiplicada por uma função de teste genérica representada na segunda curva $(\tilde{T}_{x_0}(x))$, a qual é estabelecida somente nas proximidades de um determinado ponto x_0 , o resultado da multiplicação é apresentado na terceira curva.	58
4.4	Representação de funções de base lineares $(\psi_{1E}, \psi_{1D}, \psi_{2E}, \dots)$, as quais são definidas apenas em um dos subintervalos (ou elementos) do domínio, delimitados pelos nós (1, 2, 3, 4 e 5), e são nulas nos demais.	60
4.5	Demonstração ilustrativa de uma aproximação representada através de funções de base lineares, note a aproximação é estabelecida conforme obtemos os coeficientes $(a_{1E}, a_{1D}, a_{2E}, \dots)$	61
4.6	Demonstração ilustrativa de uma aproximação obtida através de funções de base lineares, agora aplicando a condição de elementos de Lagrange.	62
4.7	Representação do reagrupamento de funções de base adjacentes, que compartilham um mesmo nó.	63
4.8	Demonstração ilustrativa de uma aproximação dada por funções de base nodais.	64
4.9	Representação gráfica da aproximação da solução do exemplo de temperatura em 1D, baseada em funções lineares nodais.	67

4.10	Demonstração do processo de discretização e resolução de equações diferenciais via método de elementos finitos em um domínio 2D. Na figura (a), temos um domínio quadrado, com um círculo centralizado (simbolizando uma partícula esférica rígida), temos as equações diferenciais a serem resolvidas e as condições de contorno para cada região. Na figura (b), temos exemplo de malha 2D, note que a densidade de malha é mais acentuada em uma região demarcada pelo círculo branco, destacando a região de interesse, já a região das bordas (menos densa) com elementos retangulares, representa um domínio onde definimos uma região de atenuação de onda acústica. Na figura (c), definimos uma onda acústica plana acendente no meio, então obtemos a solução via método de elementos finitos da equação de Helmholtz para a onda espalhada pela partícula rígida centralizada. Finalmente na figura (d) temos o resultado final interpolado.	70
5.1	Esboço da malha utilizada nas simulações numéricas para computação da força e torque de radiação acústicas em uma partícula esferoidal. O meio é modelado como uma região esférica envolvida por camadas concêntricas definidas como PML. A partícula é posicionada no centro do domínio. A linha tracejada (em azul claro) representa a superfície de integração $S1$. A melhor malha é definida na região delimitada por $S1$, com $1,746 \times 10^6$ elementos finitos. Fora de $S1$ a malha é menos densa, compreendendo $2,86 \times 10^5$ elementos. Enquanto a PML é formada por 25860 elementos. .	73
5.2	Resultados numérico e teórico da força de radiação acústica transversal, ($F_{x'}^{grad}$), em uma partícula esferoidal, em função da distância kh . A partícula (elipse cinza) tem parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$ e orientação $\alpha = 0$. Demais parâmetros da simulação, podem ser encontrados resumidos na Tab. 5.1.	75
5.3	Resultados numérico e teórico da força de radiação acústica axial, ($F_{z'}^{sca}$), em uma partícula posicionada em um nó de pressão, como função da orientação da partícula. A partícula (elipse cinza) tem parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$. Com demais parâmetros da simulação, resumidos na Tab. 5.1.	76
5.4	Resultados numérico e teórico do torque de radiação acústica em uma partícula esferoidal posicionada no nó de pressão, em função da orientação da partícula. A partícula (elipse cinza) tem parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$. Outros parâmetros da simulação, podem ser encontrados resumidos na Tab. 5.1.	76
5.5	Resultados numérico e teórico da intensidade do torque do spin em uma partícula esferoidal, em função da distância kh . A partícula (elipse cinza) tem parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$ e orientação $\alpha = 0$. Mais parâmetros da simulação, podem ser encontrados resumidos na Tab. 5.1.	77
5.6	Em azul, temos o torque de radiação acústica exercido sobre uma partícula em água (a) e no ar (b), em função do parâmetro geométrico da partícula ξ_0 , dado pela Eq. (3.68) com $\beta = \pi/4$. Os parâmetros pra a configuração na água são $a = 120 \mu\text{m}$, $f = 1 \text{ MHz}$ e $p_0 = 500 \text{ kPa}$; e no ar, $a = 680 \mu\text{m}$, $f = 40 \text{ kHz}$ e $p_0 = 3.5 \text{ kPa}$. Em vermelho, temos os resultados das simulações numéricas em elementos finitos. O valor do torque de radiação máximo foi obtido para $\xi_0 = 1.31(a/b = 1.54)$. Também apresentamos alguns exemplos de partículas com proporções diferentes ($\xi_0 = 1.1, 1.31, 4$) na figura (a). .	79

5.7	Esboço da malha axissimétrica 2D utilizada nas simulações do espalhamento de uma onda plana por uma partícula esférica rígida (a) em água, e uma RBC (b) modelada como um sólido elástico, no plasma sanguíneo. A densidade de malha mostrada é apenas para fins ilustrativos. As partículas estão destacadas em cinza e têm o mesmo diâmetro máximo $2a = 7.82 \mu\text{m}$. A superfície de integração, onde são calculados os coeficientes de espalhamento, está representada pelo círculo ciano pontilhado. O meio é modelado como uma região cilíndrica envolvida por camadas concêntricas definidas como PML.	82
5.8	Representação do modelo numérico 2D axissimétrico utilizadas para calcular o espalhamento de uma onda plana por uma partícula esférica rígida (a) em água, e uma RBC (b) modelada como um sólido elástico, no plasma sanguíneo. A densidade de malha mostrada é apenas para fins ilustrativos. As partículas estão destacadas em cinza e têm o mesmo diâmetro máximo $2a = 7.82 \mu\text{m}$. A superfície de integração, onde são calculados os coeficientes de espalhamento, está representada pelo círculo branco pontilhado. Demonstramos a parte real da pressão espalhada através da imagem de fundo, sendo as regiões em azul a pressão negativa e as regiões em amarelo-vermelho a pressão positiva.	84
5.9	Coefficientes de espalhamento de uma esfera rígida muito menor que o comprimento de onda, em função da frequência. As soluções exatas para os coeficientes, Eq. (5.7), estão representadas pelas linhas contínuas e tracejadas.	85
5.10	Coefficientes de espalhamento obtidos para uma RBC no plasma sanguíneo, em função da frequência.	85
5.11	Fatores giroacústico e acustoforético de uma RBC no plasma sanguíneo, em função da frequência. As linhas contínuas azul e verde, denotam interpolações lineares dos dados.	86

Sumário

Resumo	vii
Abstract	viii
Lista de Figuras	ix
Sumário	xiii
1 Introdução	1
2 Propagação de ondas acústica	4
2.1 Média temporal	4
2.2 Equações de conservação em um fluido ideal	5
2.2.1 Conservação de massa	6
2.2.2 Conservação de momento	6
2.2.3 Conservação da energia	9
2.3 Propagação de ondas acústicas em um fluido ideal	10
2.3.1 Equação linear da onda	11
2.3.2 Equação de <i>Helmholtz</i>	12
2.3.3 Solução da equação de <i>Helmholtz</i>	13
2.4 Equações de conservação para sólidos	17
2.4.1 Deformação	17
2.4.2 Tensão	18
2.4.3 Conservação da massa	19
2.4.4 Conservação do momento	20
2.4.5 Conservação da energia	21
2.5 Propagação de ondas acústicas em sólidos elásticos	22
2.5.1 Decomposição de Helmholtz	23
3 Força e torque de radiação acústica	25
3.1 Força de radiação por um feixe aleatório	25
3.2 Torque de radiação acústica por um feixe aleatório	27
3.3 Espalhamento acústico	28
3.3.1 Coeficiente de forma do feixe incidente	29
3.4 Interação não linear de ondas acústicas com uma partícula esférica: Efeitos de força e torque de radiação	31
3.4.1 Coeficientes de espalhamento para um esferoide rígido	32
3.4.2 Força de radiação acústica para um esferoide rígido de subcomprimento de onda	33

3.4.3	Torque de radiação acústico para um esferoide rígido de subcomprimento de onda	35
3.4.4	Demonstração com ondas planas cruzadas	36
3.5	Transferência de spin acústico para uma partícula esferoidal de subcomprimento de onda	40
3.5.1	Spin acústico de um feixe de Bessel	40
3.5.2	Torque de radiação acústico devido ao spin de um feixe de Bessel	42
3.5.3	Relação entre o spin acústico e a velocidade angular da partícula	43
3.6	Campos acústicos médios devido uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda	45
3.6.1	Coefficientes de espalhamento de uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda	48
3.6.2	Força de radiação acústica para uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda	49
3.6.3	Torque de radiação acústico para uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda	53
4	Modelo numérico	55
4.1	Método de elementos finitos	55
4.1.1	Formulação fraca	55
4.1.2	Discretizando equações na formulação fraca	60
4.1.3	Solução de equações discretizadas na formulação fraca	64
4.1.4	Comentários sobre a formulação fraca em dimensões superiores	68
5	Resultados e discussões	71
5.1	Interação não linear de ondas acústicas com uma partícula esferoidal: Efeitos de força e torque de radiação	72
5.2	Transferência de spin acústico para uma partícula esferoidal de subcomprimento de onda	77
5.3	Campos acústicos médios exercidos em uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda	78
6	Conclusões e perspectivas	87
	Referências Bibliográficas	89
	Appendices	97
A	Perfectly Matched Layers (PML)	97
A.1	Implementação de PML no COMSOL	98
A.1.1	Função de alongamento polinomial	98
A.1.2	Função de alongamento racional	98
A.1.3	Função de alongamento definida pelo usuário	99
A.1.4	Parâmetros da PML	99
B	Artigos publicados	101

1

Introdução

Quando ocorrem interações não lineares entre uma onda acústica e uma dada partícula, surgem os fenômenos de força e torque de radiação acústica [Baudoin e Thomas 2020]. Esses fenômenos regem a dinâmica das micropartículas, e essa dinâmica tem sido amplamente estudada, principalmente em dispositivos microfluídicos [Ozcelik et al. 2018] [Wu et al. 2019]. Podemos destacar alguns estudos em: separação de células tumorais [Li et al. 2015], análise da elasticidade da membrana de células por deformação acústica [Mishra, Hill e Glynne-Jones 2014], padronização de células e micropartículas [Collins et al. 2015], [Silva et al. 2019], e pinça acústica seletiva [Baudoin et al. 2019].

Usualmente, a força e o torque de radiação acústica são analisados considerando partículas perfeitamente simétricas, isto é, partículas esféricas. Contudo, geralmente as células e microrganismos detêm algum nível de anisotropia. A título de exemplo, temos estudos relevantes de sistemas acustofluídicos para manipulação de partículas assimétricas que contemplam, fibras de vidro [Schwarz, Petit-Pierre e Dual 2013], bactérias *Escherichia coli* [Ai, Sanders e Marrone 2013], glóbulos vermelhos [Jakobsson, Antfolk e Laurell 2014], microfibras [Schwarz et al. 2015], e microdiscos de alumina [Garbin et al. 2015]. Também foram realizado experimentos com sistemas de levitação acústica [Marzo et al. 2015], [Foresti e Poulikakos 2014] [Hong et al. 2017]. Dessa forma, entender a força e torque de radiação acústica em micropartículas anisotrópicas é fundamental para o estudo de sua manipulação.

Essencialmente, a modelagem da interação de ondas acústicas com partículas anisotrópicas é dominada por técnicas numéricas, a citar o método de elementos finitos, [Garbin et al. 2015], [Glynne-Jones et al. 2013], [Hahn et al. 2015], método dos elementos de contorno [Wijaya e Lim 2015], quadratura numérica [Mitri 2015], [Mitri 2016], e matriz T [Gong, Marston e Li 2019]. Embora, via de regra os métodos numéricos demandem alto custo computacional, principalmente em simulações tridimensionais inviabilizando a utilização de computadores convencionais (com 16 GB, ou até mesmo 32 GB, de memória RAM), entretanto como mostraremos neste trabalho, esses métodos tem seu valor reafirmado ao validar e complementar teorias analíticas.

Os estudos pioneiros em avaliar o torque de radiação em partículas anisotrópicas utilizaram discos circulares [Kotakl 1933], [King 1934], [Keller 1957], [Maidanik 1958]. Mais adiante, foram desenvolvidos trabalhos com a força e torque de radiação em partículas esferoidais [Fan et al. 2008], [Silva e Drinkwater 2018], [Leão-Neto, Lopes e Silva 2020]. Entretanto, até então, as análises que se propuseram à abordar a força e o torque de radiação em partículas com algum nível de anisotropia, detinham sempre algum tipo de limitação. Exemplificando, citamos um resultado baseado na aproximação de Born, que exprime o torque de radiação em um esferoide com baixo contraste acústico em relação ao fluido circundante [Jerome et al. 2019]. O método recorre à expansão em ondas parciais dos campos acústicos. Bem como necessita do conhecimento prévio do coeficiente da expansão do feixe incidente (coeficiente de forma do feixe), o qual pode ser obtido por métodos numéricos [Silva 2011], [Gong, Marston e Li 2019], e até mesmo de forma experimental [Zhao, Thomas e Marchiano 2019]. No entanto, nem sempre esses coeficientes podem ser determinados, sobretudo em dispositivos acustofluídicos, que geralmente detêm configurações espaciais complexas (ondas estruturadas).

Para partículas sem anisotropia, a força de radiação gerada por um campo acústico arbitrária pode ser facilmente obtida pela renomada teoria de Gorkov [Gor'kov 1962], precisando apenas da pressão e velocidade do fluido. Mais recentemente, de maneira semelhante, o torque de radiação em uma partícula esférica em um campo acústico arbitrário também foi derivado [Silva 2014]. Aqui, apresentaremos uma generalização das expressões de força [Silva e Drinkwater 2018] e torque [Leão-Neto, Lopes e Silva 2020], [Lopes et al. 2020] de radiação acústica gerados em um esferoide de subcomprimento de onda ao interagir com uma onda acústica incidente qualquer. Tais campos, que dependiam anteriormente dos coeficientes de expansão supracitados, passaram agora a depender apenas dos campos incidentes avaliados onde se posicionaria o centro da partícula. Embora apresentemos um modelo para uma partícula rígida, os efeitos de elasticidade e absorção da partícula poderão ser adicionados posteriormente, como já realizado para partículas esféricas [Leão-Neto e Silva 2016], [Zhang e Marston 2014]. Após apresentarmos as expressões analíticas desse estudo, iremos detalhar o modelo numérico em elementos finitos que empregamos na validação do mesmo.

Um fenômeno que está intimamente relacionado ao torque de radiação acústica é o spin acústico, o qual foi proposto e medido como uma circulação do campo de velocidade do fluido [Shi et al. 2019]. Logo após, os momentos angulares orbital e de spin foram analisados teoricamente em campos de ondas acústicas monocromáticas em um meio homogêneo [Bliokh e Nori 2019]. Todavia, mesmo antes desses estudos, deduzia-se que o spin longitudinal, no qual o eixo de rotação é paralelo à direção de propagação de um feixe acústico de Bessel, poderia induzir o torque de radiação acústica em uma partícula esférica absorvedora de subcomprimento de onda [Silva 2014]. Então, apresentaremos o torque de radiação acústica em uma partícula esferoidal devido a interação com um feixe

de Bessel com vorticidade de primeira ordem, através de uma abordagem que o relaciona com o spin acústico. De forma suplementar, também iremos expor a relação entre o spin acústico e a velocidade angular da partícula. Novamente, após demonstrar as equações analíticas iremos descrever o modelo numérico que utilizamos para validar as previsões do torque de radiação acústica da partícula em função do spin acústico.

Por outro lado, quando elevamos ainda mais o nível de complexidade da geometria, saindo do campo das partículas esféricas e esferoidais, as soluções são dificultadas, geralmente se restringindo à métodos puramente numéricos, que usualmente partem de uma dada posição e orientação da partícula no campo incidente, de modo que para qualquer alteração, os campos acústicos médios devem ser recalculados, o que pode se tornar uma tarefa computacionalmente muito intensa. Contudo, apresentaremos também uma abordagem semi-analítica para descrever os campos acústicos médios em partículas axissimétricas arbitrarias devido a interação com uma onda acústica qualquer. Ao obtermos os coeficientes de espalhamento de monopolo e dipolo da partícula axissimétrica por meio do método de elementos finitos, em uma dada configuração espacial para cada modo correspondente, podemos através desses coeficientes, relacionar os campos médios da partícula com a pressão e velocidade do fluido da onda incidente, obtendo assim uma generalização para qualquer onda incidente. Então, apresentaremos o modelo numérico em elementos finitos que utilizamos para computar de maneira bastante eficiente, os coeficientes necessários.

Aqui, introduzimos os temas abordados nos trabalhos mencionados. No capítulo 2 serão apresentadas a fundamentação teórica e matemática empregada na obtenção dos resultados analíticos apresentados no capítulo 3. Posteriormente, no capítulo 4, descreveremos o método de elementos finitos, o qual foi empregado no desenvolvimento das simulações utilizadas para obtenção dos resultados numéricos. No capítulo 5, detalhamos as simulações numéricas desenvolvidas em cada trabalho, e explicitamos todos os resultados obtidos, comparando os resultados numéricos e os analíticos. Em seguida, se encontram as conclusões, perspectivas e as referências.

2

Propagação de ondas acústica

Este capítulo abrange os princípios físicos e matemáticos que serviram de fundamentação teórica para os resultados obtidos neste trabalho. Começamos com uma introdução à média temporal de funções periódicas, depois mostramos as equações de dinâmica dos fluidos oriundas das equações de conservação de massa, energia e momento, dessa forma, descreveremos a propagação de uma onda acústica em um fluido ideal, o que nos leva a equação de Helmholtz. De forma análoga, iremos expor os princípios de conservação para sólidos, de modo a demonstrar as relações entre a tensão e deformação que governam a propagação de ondas em sólidos, e assim compor a equação de Helmholtz para sólidos elásticos.

2.1 Média temporal

As ondas acústicas são descritas essencialmente por funções periódicas, de modo que a força de radiação derivada destes campos, são obtidas através de médias temporais. Assim, saibamos que a média temporal de uma função g ao longo de um período de oscilações completo $T = 2\pi/\omega$ é dado por:

$$\bar{g} = \frac{\omega}{2\pi} \int_{t_0}^{t_0+2\pi/\omega} g(t) dt. \quad (2.1)$$

Ademais, embora grandezas físicas como a pressão e velocidade do fluido sejam quantidades reais, elas são frequentemente representadas por meio de funções complexa. Dessa forma, se faz necessário apresentarmos algumas propriedades pertinentes das médias temporais do produto de funções harmônicas complexas. Assim, consideremos as funções harmônicas complexas de primeira ordem a seguir:

$$g(t) = g_1 e^{-i(\omega t + \alpha_1)}, \quad (2.2)$$

$$h(t) = h_1 e^{-i(\omega t + \beta_1)}, \quad (2.3)$$

sendo g_1 e h_1 as amplitudes, e α_1 e β_1 as fases das suas respectivas funções. Mesmo utilizando funções complexas, quando queremos extrair a força de radiação, somente a parte real dessas funções geram efeitos computáveis. Com isso, por meio da Eq. (2.1) temos que

$$\overline{\text{Re}[g]\text{Re}[h]} = \frac{\omega}{2\pi} \int_{t_0}^{t_0 + \frac{2\pi}{\omega}} g_1 h_1 \cos(\omega t + \alpha_1) \cos(\omega t + \beta_1) dt, \quad (2.4)$$

onde Re representa a parte real da função. Então, se substituirmos a relação

$$\cos(\omega t + \alpha_1) \cos(\omega t + \beta_1) = \frac{1}{2} [\cos(2\omega t + \alpha_1 + \beta_1) + \cos(\alpha_1 - \beta_1)] \quad (2.5)$$

na Eq. (2.4), obtemos

$$\overline{\text{Re}[g]\text{Re}[h]} = \frac{1}{2} g_1 h_1 \cos(\alpha_1 - \beta_1) = \frac{1}{2} \text{Re}[g^* h] = \frac{1}{2} \text{Re}[gh^*], \quad (2.6)$$

onde o asterisco (*) representa o complexo conjugado, e o primeiro termo após a igualdade na Eq. (2.5) desapareceu, pois é oriundo de uma subtração de funções seno defasadas em um período completo.

2.2 Equações de conservação em um fluido ideal

Ao estudarmos a dinâmica dos fluidos, é comum desprezarmos as subdivisões convencionais da matéria (moléculas, átomos, ...), assim considerando o fluido como um meio contínuo. Dessa forma, adotemos um fluido ideal, de modo que as propriedades macroscópicas do mesmo sejam constantes. Ao analisarmos o movimento do fluido, convém subdividir sua extensão em pequenos elementos fixos em relação a um sistema referencial, para qualquer tempo t . Tomando um elemento qualquer, de volume fixo V_0 e posição \mathbf{r} , que envolva um número suficientemente grande de átomos ou moléculas que estejam em equilíbrio termodinâmico, podem-se definir grandezas físicas para o elemento de fluido, tais como, densidade velocidade, pressão, energia interna e entropia [Neto 2015], [Andrade 2014].

De antemão, apresentamos o teorema da divergência de Gauss, pois o mesmo será utilizado com certa frequência daqui por diante, assim, o mesmo estabelece a relação a seguir para um determinado campo vetorial $\mathbf{B}(\mathbf{r})$:

$$\int_{V_0} \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \int_{S_0} \mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} \quad (2.7)$$

onde \mathbf{n} é o vetor que aponta para fora na direção normal à superfície S_0 , e $d^3 \mathbf{r}$ e $d^2 \mathbf{r}$ são os elementos de integração de volume e área, respectivamente.

2.2.1 Conservação de massa

Tomando um elemento de fluido de volume V_0 e posição \mathbf{r} , e estabelecendo que o mesmo possui um número N de átomos ou moléculas em um instante de tempo t , podemos definir a densidade $\rho(\mathbf{r}, t)$, como

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^N m_i, \quad (2.8)$$

onde, m_i corresponde à massa do i -ésimo átomo ou molécula dentro do volume V_0 . Consequentemente, a velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ do centro de massa do elemento de volume V_0 em qualquer instante de tempo t é estabelecido por

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)V_0} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \quad (2.9)$$

onde \mathbf{v}_i , denota a velocidade do i -ésimo átomo ou molécula do elemento de volume V_0 .

Sabendo que a massa não pode ser criada ou destruída dentro do elemento de fluido, então a massa total englobada só pode variar devido a convecção. Deste modo, o fluxo de massa por unidade de área e por tempo ($\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$) é definido como o produto da densidade $\rho(\mathbf{r}, t)$ com a velocidade de convecção $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. Assim, note que a variação da massa total englobada pelo volume V_0 depende do fluxo de massa através da superfície S_0 do volume V_0 (ver Fig. 2.1), o que gera a relação a seguir:

$$\partial_t \int_{V_0} \rho \, d^3\mathbf{r} + \int_{S_0} \rho \mathbf{v} \cdot d^2\mathbf{r} = 0, \quad (2.10)$$

onde $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$ denota a derivada parcial com relação ao tempo. Perceba, como o volume V_0 é fixo podemos aplicar a derivada diretamente na densidade. Ademais, aplicando o teorema da divergência de Gauss, Eq. (2.7), transformamos a integral de superfície da Eq. (2.10) em uma integral de volume, como a seguir:

$$\int_{S_0} \rho \mathbf{v} \cdot d^2\mathbf{r} = \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \, d^3\mathbf{r} \quad (2.11)$$

Portanto, substituindo a Eq. (2.11) na Eq. (2.10), obtemos

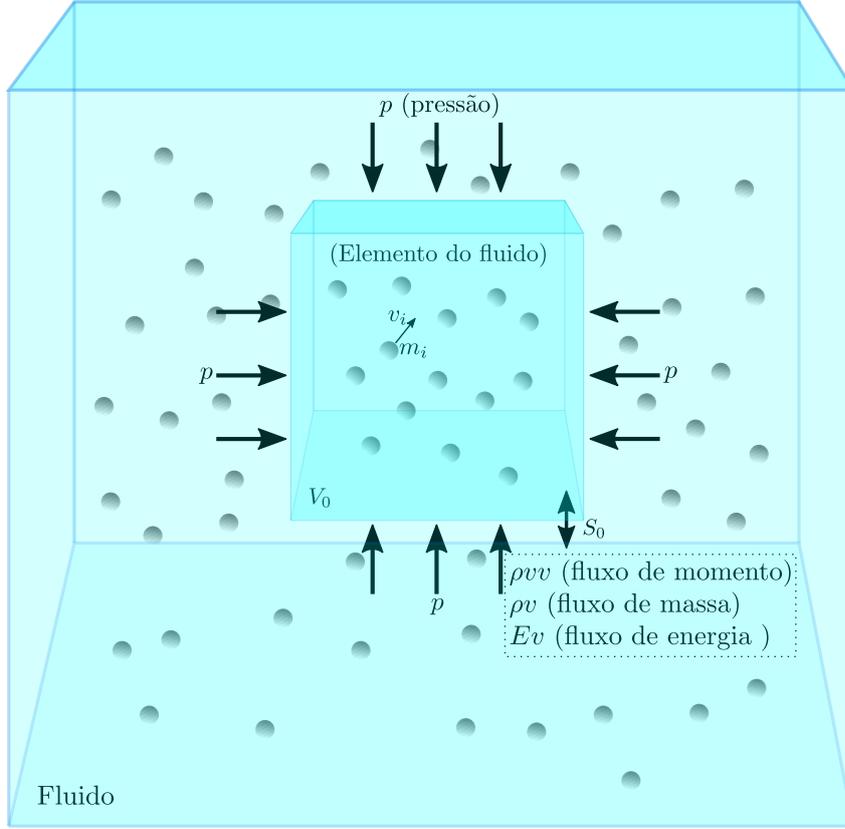
$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \quad (2.12)$$

sendo esta a equação de conservação de massa para um fluido ideal.

2.2.2 Conservação de momento

Em um dado instante de tempo t , o momento linear em um volume de fluido V_0 fixo é estabelecido como $\rho \mathbf{v}$. Semelhantemente à variação de massa, o momento linear

Figura 2.1: Ilustração das forças atuando em um elemento de fluido de volume V_0 ocupado por partículas de massa m_i e velocidade v_i .



Fonte: autor, 2023.

pode ser alterado em virtude da convecção, logo, o fluxo de momento linear é dado por $\rho \mathbf{v} \mathbf{v}$. Todavia, a taxa de variação de momento linear total em um volume V_0 , também é influenciada pela pressão (p) normal à superfície S_0 do volume V_0 , bem como pode sofrer alterações devido forças volumétricas, que atuam ao longo de toda a extensão do fluido, como por exemplo a força gravitacional, ou a força elétrica. Desta forma, a variação da taxa de momento linear no volume V_0 de um fluido ideal é dado por

$$\partial_t \int_{V_0} \rho \mathbf{v} \, d^3 \mathbf{r} + \int_{S_0} p \, \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} + \int_{S_0} \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V d^3 \mathbf{r} = \mathbf{0}, \quad (2.13)$$

onde \mathbf{f}^V é a densidade de força volumétrica, $p(\mathbf{r}, t)$ é a pressão em \mathbf{r} , e a quantidade $\mathbf{v} \mathbf{v}$ é um diade, isto é, um tensor de segunda ordem. Mais uma vez, podemos transformar as integrais de superfície em integrais de volume através do teorema de Gauss, no entanto em sua versão para tensores [Mase 1970], transformando a Eq. (2.13) na equação de conservação do momento linear em sua forma integral:

$$\partial_t \int_{V_0} \rho \mathbf{v} \, d^3 \mathbf{r} + \int_{V_0} \nabla p \, \mathbf{n} d^3 \mathbf{r} + \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) \, \mathbf{n} d^3 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V d^3 \mathbf{r} = \mathbf{0}. \quad (2.14)$$

Uma vez que o volume V_0 é fixo e arbitrário, também temos a equação diferencial parcial da conservação do momento

$$\partial_t(\rho\mathbf{v}) + \nabla p + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v}) + \mathbf{f}^V = \mathbf{0}. \quad (2.15)$$

No estudo da propagação do som, para a maioria das frequências as forças volumétricas como a gravidade são desprezíveis (com exceção de frequências extremamente baixas, por exemplo, aquelas da ordem ou menor que g/c , onde g é a aceleração devido à gravidade e c é a velocidade do som [Pierce 2019]), então devido à sua menor intensidade em relação as demais forças da Eq. (2.15), podemos considerar $\mathbf{f}^V = \mathbf{0}$. Além disso, podemos escrever o gradiente de pressão em termos de um tensor de segunda ordem, como $\nabla p = \nabla \cdot (p\mathbf{I})$, onde \mathbf{I} é um tensor unitário. Dessa forma, definimos o tensor de tensões para fluido não viscoso como

$$\mathbf{S} = p\mathbf{I} + \rho\mathbf{v}\mathbf{v}, \quad (2.16)$$

e com isso, reescrevermos a Eq. (2.15) da seguinte forma:

$$\partial_t(\rho\mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{S} = \mathbf{0}. \quad (2.17)$$

Para a posterior dedução da força de radiação acústica, é útil reescrevermos a Eq. (2.17), por meio da seguinte relação matemática

$$\nabla \cdot \rho\mathbf{v}\mathbf{v} = (\nabla \cdot \rho\mathbf{v})\mathbf{v} + \rho\mathbf{v} \cdot \nabla\mathbf{v}. \quad (2.18)$$

Onde podemos substituir a equação de conservação de massa, Eq.(2.12), na relação acima, Eq. (2.18), obtendo

$$\nabla \cdot \rho\mathbf{v}\mathbf{v} = -(\partial_t\rho)\mathbf{v} + \rho\mathbf{v} \cdot \nabla\mathbf{v}. \quad (2.19)$$

Por conseguinte, utilizando essa expressão, Eq.(2.19), na equação que queremos reescrever, Eq. (2.17), temos como resultado

$$\partial_t(\rho\mathbf{v}) + \nabla p - (\partial_t\rho)\mathbf{v} + \rho\mathbf{v} \cdot \nabla\mathbf{v} = 0, \quad (2.20)$$

ou

$$\rho(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} + \nabla p = 0, \quad (2.21)$$

onde temos o operador material, em parênteses, dado por

$$D_t \equiv (\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla). \quad (2.22)$$

Logo, temos

$$\rho D_t \mathbf{v} = -\nabla p. \quad (2.23)$$

Assim sendo, uma outra forma de expressarmos a equação de conservação de momento linear em um fluido ideal.

2.2.3 Conservação da energia

Para a conservação de energia em um fluido ideal temos além das contribuições da convecção, a influência de efeitos termodinâmicos. Dessa forma, para tratarmos da termodinâmica dos fluidos é conveniente utilizarmos quantidades termodinâmicas por unidade de massa. Deste modo, empregaremos a letra u para representar a energia interna por unidade de massa de um volume fixo V_0 , e a letra s para representar a entropia por unidade de massa. Assim, a primeira lei da termodinâmica relaciona o aumento da energia interna com o trabalho realizado sobre o elemento de volume, e o calor Tds , da seguinte forma:

$$du = Tds - pd(\rho^{-1}) = Tds + \frac{p}{\rho^2}d\rho, \quad (2.24)$$

onde $T(\mathbf{r}, t)$ é a temperatura na posição r no instante de tempo t . Admitindo que o transporte de calor no fluido é lento em comparação com a propagação do som no meio, nos remete a um processo adiabático ($ds = 0$), a primeira lei da termodinâmica é reduzida para $du = p\rho^{-2}d\rho$, de maneira que, a energia interna e também a pressão possam ser expressas como equações de estado em função da densidade,

$$p = p(\rho), \quad (2.25)$$

$$u = u(\rho). \quad (2.26)$$

Por sua vez, a densidade de energia em um volume V_0 é dada pela soma da densidade de energia cinética com a densidade de energia interna,

$$E(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho v^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \rho u(\mathbf{r}, t). \quad (2.27)$$

De forma análoga à variação de momento linear, a densidade de energia em um fluido de volume V_0 pode variar por convecção através da superfície S_0 , bem como por conta da variação do trabalho realizado por uma força gerada pela pressão na superfície S_0 . Sendo que, a densidade de energia de convecção é dada em termos do fluxo de energia $(\rho v^2/2 + \rho u)\mathbf{v}$, enquanto que a variação do trabalho devido à pressão é $p\mathbf{v}$ (ver Fig. 2.1). Assim, a variação da taxa de densidade de energia em um volume V_0 pra um fluido ideal

é expressa por

$$\partial_t \int_{V_0} \left(\frac{\rho v^2}{2} + \rho u \right) d^3 \mathbf{r} + \int_{S_0} \left(\frac{\rho v^2}{2} + \rho u \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} + \int_{S_0} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} = 0. \quad (2.28)$$

Novamente utilizando o teorema de Gauss, Eq. (2.7), além do fato de V_0 ser fixo e arbitrário, obtemos a equação de conservação da energia para um fluido ideal:

$$\partial_t \left(\frac{\rho v^2}{2} + \rho u \right) + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\rho v^2}{2} + \rho u + p \right) \mathbf{v} \right] = 0. \quad (2.29)$$

Com mais esta equação, concluimos as explanações dos princípios de conservação em um fluido ideal, partindo agora para os fundamentos de propagação.

2.3 Propagação de ondas acústicas em um fluido ideal

Associando as equações de conservação da massa, Eq.(2.12), conservação de momento linear, Eq. (2.17), e da equação de estado da pressão em termos da densidade, Eq. (2.25), podemos descrever a dinâmica de propagação de ondas em um fluido ideal, sendo elas, respectivamente:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \quad (2.30a)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{S} = 0, \quad (2.30b)$$

$$p = p(\rho). \quad (2.30c)$$

Para tal, consideremos o fluido homogêneo, de modo a ter uma densidade ρ_0 e uma pressão p_0 , ambos constantes. Assim, expandindo a pressão, em séries de Taylor em torno da densidade ρ_0 , obtemos:

$$p - p_0 = \sum_{n=1}^{\infty} (\rho - \rho_0)^n \frac{(\partial_{\rho}^n p)_{\rho_0}}{n!}, \quad (2.31)$$

onde $\partial_{\rho} = \frac{\partial}{\partial \rho}$ é a derivada parcial com relação à densidade, nesta aplicação representa a variação da pressão em função da densidade do fluido, ou seja, ondas de pressão, ou como são reconhecidas cotidianamente, o som. Note que a derivada parcial de primeira ordem $(\partial_{\rho} p)_{\rho_0}$, tem dimensão de velocidade ao quadrado, então podemos inferir que a velocidade do som pode ser definida como

$$c_0^2 = (\partial_{\rho} p)_{\rho_0}. \quad (2.32)$$

Via de regra, as equações parciais não-lineares são de difícil solução analítica, as equações que descrevem a dinâmica de uma onda sonora em um fluido ideal, reforçam essa regra. No entanto, como comprovaremos ao longo deste trabalho, as mesmas detêm soluções

aproximadas bastante satisfatórias, as quais podemos obter pelo método de aproximações sucessivas. Neste método, expandimos a pressão, a densidade e a velocidade em potências de um pequeno parâmetro \mathcal{M} , conhecido como número de Mach, sendo este uma medida adimensional da velocidade definida por

$$\mathcal{M} = \frac{v_0}{c_0}, \quad (2.33)$$

onde v_0 é a magnitude máxima da velocidade do elemento de fluido e c_0 é a velocidade do som no fluido. Por consequência, nossos estudos estão delimitados a um regime de baixa velocidade, $\mathcal{M} \ll 1$. Dessa forma, podemos escrever a pressão, a densidade e a velocidade, como:

$$p - p_0 = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{M}^n p^{(n)}, \quad (2.34)$$

$$\rho - \rho_0 = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{M}^n \rho^{(n)}, \quad (2.35)$$

$$\mathbf{v} = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{M}^n \mathbf{v}^{(n)}, \quad (2.36)$$

onde o índice n denota a ordem da expansão. A aproximação linear é suficiente para descrever os fenômenos de espalhamento da onda. Para a derivação da força de radiação acústica, utilizaremos os campos acústicos de segunda ordem, todavia, posteriormente veremos que estes campos podem ser representados através de termos de primeira ordem, deste modo, avaliaremos primeiramente os termos lineares.

2.3.1 Equação linear da onda

Dentro do limite das pequenas perturbações, ou seja $\mathcal{M} \ll 1$, os campos acústicos podem ser representados pela aproximação linear, sendo assim, a partir das Eqs. (2.34)-(2.36) obtemos os campos de pressão, densidade e velocidade do elemento de fluido, nesta ordem, como:

$$p - p_0 = \mathcal{M} p^{(1)}, \quad (2.37)$$

$$\rho - \rho_0 = \mathcal{M} \rho^{(1)}, \quad (2.38)$$

$$\mathbf{v} = \mathcal{M} \mathbf{v}^{(1)}. \quad (2.39)$$

Substituindo as Eqs. (2.37), (2.38) e (2.32) na Eq. (2.31), com $n = 1$, temos a aproximação linear da expansão da pressão em função da densidade,

$$p^{(1)} = c_0^2 \rho^{(1)}. \quad (2.40)$$

Por sua vez, ao substituírmos as Eqs. (2.37)-(2.39) nas equações de conservação de massa (2.30a) e conservação do momento linear (2.30b), mantendo apenas os termos de primeira ordem e eliminando a densidade por meio da Eq. (2.40), encontramos

$$\frac{1}{c_0^2} \partial_t p^{(1)} + \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{v}^{(1)} = 0, \quad (2.41)$$

$$\rho_0 \partial_t \mathbf{v}^{(1)} + \nabla p^{(1)} = 0. \quad (2.42)$$

as quais constituem as equações lineares de dinâmica dos fluidos.

Empregando o rotacional na Eq. (2.42), visto que o rotacional de um gradiente é sempre nulo ($\nabla \times \nabla p^{(1)} = 0$), identificamos que a velocidade do elemento de fluido é irrotacional, pois obtemos

$$\nabla \times \mathbf{v}^{(1)} = 0. \quad (2.43)$$

Dessarte, por definição, podemos escrever a velocidade do elemento de fluido como o gradiente de uma função potencial escalar $\phi(\mathbf{r}, t)$, como se segue:

$$\mathbf{v}^{(1)} = \nabla \phi. \quad (2.44)$$

Utilizando essa decorrência na Eq. (2.42), temos a pressão em função do mesmo potencial,

$$p^{(1)} = -\rho_0 \partial_t \phi. \quad (2.45)$$

Com isso, se substituírmos a velocidade e a pressão do elemento de fluido escritas como funções do potencial de velocidade, na Eq. (2.41), obtemos a equação linear da onda para o potencial de velocidade

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c_0^2} \partial_t^2 \right) \phi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2.46)$$

Como consequência direta, a pressão e a velocidade do elemento de fluido satisfazem a equação linear da onda.

2.3.2 Equação de *Helmholtz*

Os fenômenos de força e torque de radiação acústica decorrem da interação com campos acústicos que possuem variação temporal harmônica. Assim, admitindo que estes campos oscilam com frequência angular $\omega = 2\pi f$, temos que o potencial de velocidade do elemento de fluido pode ser escrito como

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}. \quad (2.47)$$

onde podemos inferir que $\phi(\mathbf{r})$ é a amplitude do potencial de velocidade do elemento de fluido. Sendo assim, ao substituírmos a Eq. (2.47) na equação linear da onda, Eq. (2.46),

obtemos a conhecida equação de Helmholtz:

$$(\nabla^2 + k^2)\phi(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.48)$$

onde $k = \omega/c_0$ é o número de onda.

Solucionando a equação de Helmholtz podemos obter a amplitude do potencial de velocidade para uma dada configuração, descrita a partir das condições de contorno do problema, e por consequência também obtemos os campos de pressão e velocidade do fluido, necessários para a computação da força e torque de radiação acústicos.

Para apresentarmos uma solução da equação de Helmholtz, primeiramente precisamos escolher o sistema de coordenadas que mais se adéque ao nosso problema, aqui utilizaremos o sistema de coordenadas esféricas (r, θ, φ) , onde r é a distância radial, θ é o ângulo polar e φ é o ângulo azimutal, de acordo com o ilustrado na Figura (2.2). Sendo assim, as regras de transformação das coordenadas esféricas (r, θ, φ) em cartesianas (x, y, z) estão descritas a seguir:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad (2.49)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad (2.50)$$

$$z = r \cos \theta, \quad (2.51)$$

onde, r é medido a partir da origem dos eixos xyz com intervalo de $0 \leq r \leq \infty$, o ângulo θ é medido a partir do eixo z positivo com intervalo de $0 \leq \theta \leq \pi$ e o ângulo φ é medido no plano xy a partir do eixo x positivo com intervalo de $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. De modo que, o vetor unitário radial (\mathbf{e}_r) é dado por:

$$\mathbf{e}_r = \sin \theta \cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z. \quad (2.52)$$

onde \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y e \mathbf{e}_z são os vetores unitários cartesianos.

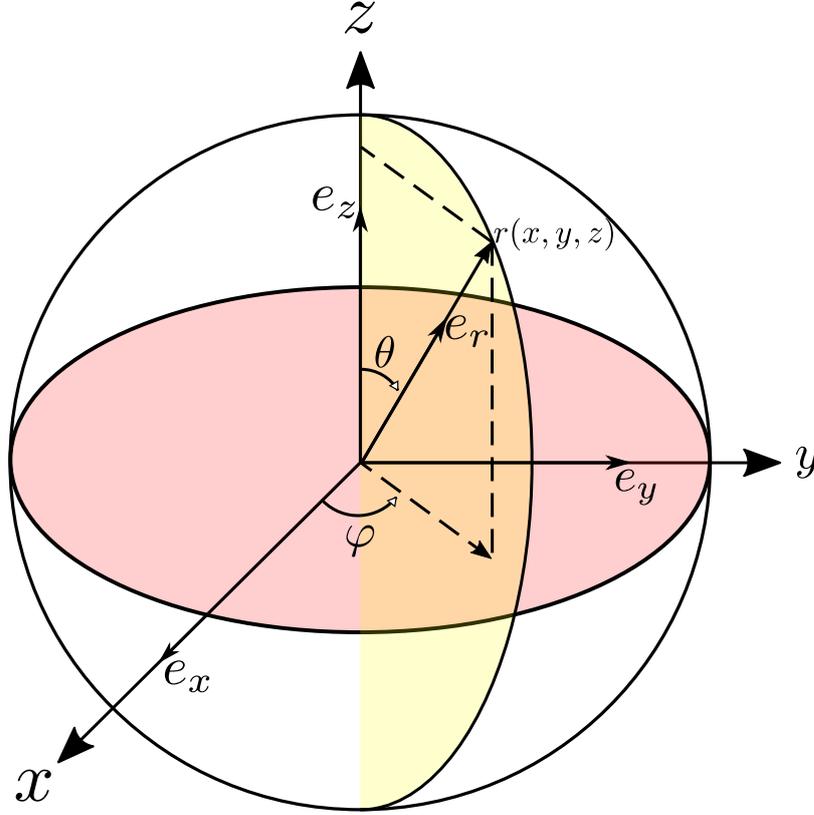
2.3.3 Solução da equação de *Helmholtz*

Aplicando o laplaciano em coordenadas esféricas na equação de onda de Helmholtz (2.48), obtemos:

$$\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \phi) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta \phi) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \phi + k^2 \phi = 0. \quad (2.53)$$

A maneira mais usual de resolver esta equação diferencial parcial é decompondo-a em um conjunto de equações diferenciais ordinárias, o que executaremos por meio do método de

Figura 2.2: Coordenadas esféricas (r, θ, φ) , onde: r é a distância radial, θ (theta) é o ângulo polar e φ (phi) é o ângulo azimutal; e_r é o vetor unitário na direção radial, e (e_x, e_y, e_z) são os vetores unitários cartesianos.



Fonte: Autor, 2023.

separação de variáveis, através da pressuposição:

$$\phi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi), \quad (2.54)$$

onde $R(r)$, $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\varphi)$ são funções arbitrárias das variáveis radial, polar e azimutal, nessa ordem. Substituindo a Eq. (2.54) na Eq. (2.53), e em seguida dividindo por $R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$, temos

$$\frac{1}{r^2 R} d_r(r^2 d_r R) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} d_\theta(\sin \theta d_\theta \Theta) + \frac{1}{\Phi r^2 \sin^2 \theta} d_\varphi^2 \Phi + k^2 = 0. \quad (2.55)$$

onde $d_r = \frac{d}{dr}$, $d_\theta = \frac{d}{d\theta}$ e $d_\varphi^2 = \frac{d^2}{d\varphi^2}$. Note que, neste passo pudemos substituir todas as derivadas parciais por derivadas totais. Multiplicando por $r^2 \sin^2 \theta$, obtemos:

$$\frac{1}{\Phi} d_\varphi^2 \Phi = r^2 \sin^2 \theta \left[-\frac{1}{r^2 R} d_r(r^2 d_r R) - \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} d_\theta(\sin \theta d_\theta \Theta) - k^2 \right]. \quad (2.56)$$

Observe que no lado esquerdo da Eq. (2.56) temos uma função que depende somente de φ e no lado direito temos apenas funções que dependem de r e θ . Assim, como r, θ e φ são variáveis independentes, nos é permitido igualar ambos os lados da equação a uma constante:

$$\frac{1}{\Phi} d_\varphi^2 \Phi = -m^2, \quad (2.57)$$

$$r^2 \sin^2 \theta \left[-\frac{1}{r^2 R} d_r(r^2 d_r R) - \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} d_\theta(\sin \theta d_\theta \Theta) - k^2 \right] = -m^2, \quad (2.58)$$

onde m deve ser inteiro, e será estipulado de acordo com as configurações do problema. Multiplicando a Eq. (2.58) por r^2 e remanejando os termos de acordo com as variáveis, encontramos

$$r^2 k^2 + \frac{1}{R} d_r(r^2 d_r R) = -\frac{1}{\Theta \sin \theta} d_\theta(\sin \theta d_\theta \Theta) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta}. \quad (2.59)$$

De forma análoga, também podemos igualar cada lado da Eq. (2.59) a uma constante, obtendo:

$$-\frac{1}{\Theta \sin \theta} d_\theta(\sin \theta d_\theta \Theta) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = n(n+1), \quad (2.60)$$

$$r^2 k^2 + \frac{1}{R} d_r(r^2 d_r R) = n(n+1), \quad (2.61)$$

Ou ainda,

$$\frac{1}{\sin \theta} d_\theta(\sin \theta d_\theta \Theta) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta + n(n+1)\Theta = 0 \quad (2.62)$$

$$k^2 R + \frac{1}{r^2} d_r(r^2 d_r R) - \frac{n(n+1)}{r^2} R = 0, \quad (2.63)$$

onde n da mesma forma que m é um inteiro a ser determinado. A Eq. (2.57) aceita soluções do tipo:

$$\Phi = \Phi_1 e^{im\varphi}, \quad (2.64)$$

onde Φ_1 é uma constante e como m é um inteiro, de modo que a periodicidade e a continuidade da solução são mantidas.

Com o intuito de facilitar a obtenção da solução da Eq. (2.62), façamos uma substituição de variável $\eta = \cos \theta$, onde pela regra da cadeia temos:

$$d_\theta \Theta = d_\eta \Theta d_\theta \eta = (\sin \theta) d_\eta \Theta, \quad (2.65)$$

isolando apenas o operador de derivada, para simplificar a substituição, temos:

$$d_\theta = \sin \theta d_\eta. \quad (2.66)$$

Assim, substituindo a Eq. (2.66) na Eq. (2.62), tendo que $\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta$, ou em nossa substituição como $\sin^2 \theta = 1 - \eta^2$, chegando em

$$d_\eta [(1 - \eta^2)d_\eta \Theta(\eta)] + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] \Theta(\eta) = 0. \quad (2.67)$$

A qual é conhecida como uma equação associada de Legendre, tendo solução dada por [Machado 2004]

$$\Theta(\theta) = \Theta_1 P_n^m(\cos \theta) \quad (2.68)$$

onde $P_n^m(\cos \theta)$ são as funções associadas de Legendre e Θ_1 é uma constante.

As funções angulares Θ e Φ , podem ser convenientemente combinadas em uma função denominada como harmônicos esféricos Y_n^m , como a seguir [Machado 2004]

$$\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = Y_n^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} P_n^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad n \geq 0, \quad -n \leq m \leq n. \quad (2.69)$$

Já a Eq. (2.63) é intitulado como equação esférica de Bessel, tendo solução dada por [Machado 2004]

$$R(r) = R_1 j_n(kr) + R_2 y_n(kr), \quad (2.70)$$

onde j_n e y_n são funções esféricas de Bessel e Neumann de ordem n , e R_1 e R_2 são constantes. Uma forma alternativa de expressar essa solução é como [Williams 1999]

$$R(r) = R_3 h_n^{(1)}(kr) + R_4 h_n^{(2)}(kr), \quad (2.71)$$

onde $h_n^{(1)}(kr)$ e $h_n^{(2)}(kr)$ são funções esféricas de Hankel de primeiro e segundo tipo e ordem n , e R_3 e R_4 são constantes.

Agora que obtemos separadamente as soluções das equações radial, polar e azimutal, a solução geral de Helmholtz é dada a partir da Eq. (2.54), como

$$\phi(kr, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [a_{nm} j_n(kr) + b_{nm} y_n(kr)] Y_n^m(\theta, \varphi). \quad (2.72)$$

Ou, de modo alternativo por

$$\phi(kr, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n [s_{nm} h_n^{(1)}(kr) + c_{nm} h_n^{(2)}(kr)] Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (2.73)$$

onde a_{nm} , b_{nm} , s_{nm} e c_{nm} são constantes a serem determinadas de acordo com as condições de contorno específicas de cada problema acústico.

2.4 Equações de conservação para sólidos

A partir deste momento iniciaremos a discorrer sobre sólidos, fazendo um paralelo do que foi exposto sobre fluidos. Desta forma, introduziremos os conceitos de conservação (massa, energia e momento) para um sólido elástico, previamente apresentando os conceitos de deformação, tensão e as relações constituintes. Com o objetivo de evitar a complexidade dos cálculos tensoriais, os conceitos por vir, serão expostos através de coordenadas cartesianas no formato x_i ($i = 1, 2, 3$).

2.4.1 Deformação

Consideremos que um meio contínuo de volume V_0 e superfície S_0 sofreu uma deformação. A priori (anterior à deformação) um ponto P_0 desse volume era localizado pelo vetor $\mathbf{R}(x_1, x_2, x_3)$, enquanto um outro ponto P_1 , disposto nas proximidades de P_0 , era situado pelo vetor $d\mathbf{R}$ medido em relação a P_0 . Após a deformação, vamos nomear o volume e a superfície por V'_0 e S'_0 , respectivamente, enquanto o ponto P_0 passa a ser intitulado como P'_0 e localizado por $\mathbf{r}(x_1, x_2, x_3)$, da mesma forma que o ponto P_1 será referido como P'_1 e localizado pelo vetor $d\mathbf{r}$ em relação a P'_0 , como esboçado na Fig. 2.3. Bem como, o deslocamento de P_0 para P'_0 é definido pelo vetor $\mathbf{w}(w_1, w_2, w_3)$. Assim, as relações entre os vetores delineados na Fig. 2.3 são dadas por

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \mathbf{w}, \quad (2.74)$$

$$\mathbf{w} + d\mathbf{r} = d\mathbf{R} + \mathbf{W}. \quad (2.75)$$

Perceba que, a partir da Eq. (2.74), intuímos que $d\mathbf{r} = d\mathbf{R} + \mathbf{w}$. Portanto, substituindo essa equação na Eq. (2.75), temos

$$\mathbf{W} = \mathbf{w} + d\mathbf{w}. \quad (2.76)$$

De modo que, também podemos expressar $d\mathbf{w}_i$ da seguinte forma:

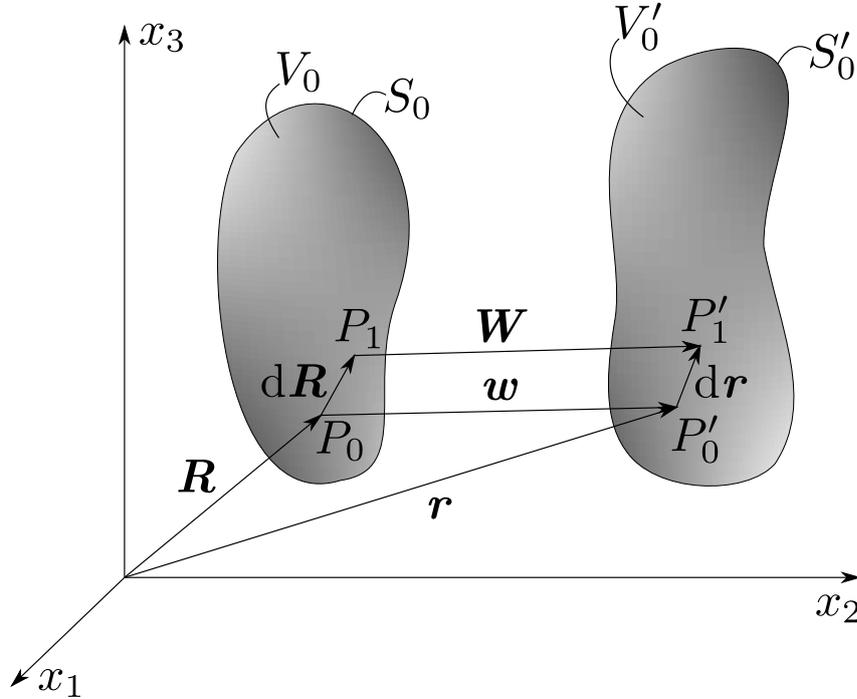
$$d\mathbf{w}_i = \partial_j \mathbf{w}_i dx_j \quad (2.77)$$

onde $\partial_j = \partial/\partial x_j$. Ademais, podemos reescrever essa equação como

$$d\mathbf{w}_i = \frac{1}{2}(\partial_j \mathbf{w}_i + \partial_i \mathbf{w}_j) dx_j + \frac{1}{2}(\partial_j \mathbf{w}_i - \partial_i \mathbf{w}_j) dx_j. \quad (2.78)$$

Sendo assim, podemos definir os tensores infinitesimais de deformação e rotação para

Figura 2.3: Representação da deformação de um meio contínuo de volume V_0 e superfície S_0 resultando em um volume V'_0 e superfície S'_0 (desconsiderar o deslocamento lateral, foi ilustrado dessa forma apenas para melhor demonstrar a soma dos vetores, de forma a não aglomerá-los.)



Fonte: autor, 2023.

pequenas deformações como

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j w_i + \partial_i w_j), \quad w_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j w_i - \partial_i w_j), \quad (2.79)$$

ou na forma vetorial, com a deformação sendo dada por

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{w} + \nabla \mathbf{w}^T), \quad (2.80)$$

onde $\nabla \mathbf{w}$ é o tensor de segunda ordem e o sobrescrito T remete à transposta do tensor correspondente. Logo, a Eq. (2.78) nos mostra que a cinemática de um ponto arbitrário na vizinhança de um ponto P_0 é governada pelo campo gradiente local $\partial_j w_i$ e que esse movimento é resultante da combinação de efeitos locais de distorção ϵ_{ij} e a rotação de corpo rígido w_{ij} .

2.4.2 Tensão

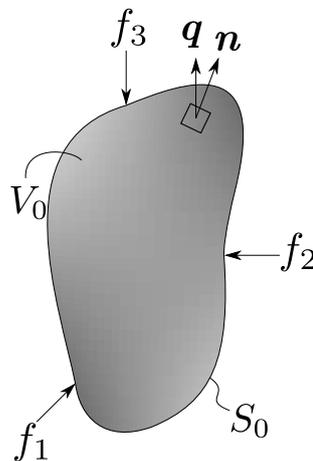
Supondo um meio contínuo de volume V_0 e superfície S_0 onde agem forças f_i ($i = 1, 2, 3$), como ilustrado na Fig. 2.4. Se um objeto for deformado devido a atuação dessas forças, a distribuição de suas moléculas é alterada, dessa forma este corpo já não se

encontra em seu estado de equilíbrio original. Em compensação, o vetor de tração interno \mathbf{q} age como reação à atuação dessas forças, tentando restaurar o corpo ao equilíbrio. Considerando um elemento de superfície arbitrário com vetor normal \mathbf{n} , em relação a essa superfície, como esboçado na Fig. 2.4, o vetor tração é definido por

$$\mathbf{q} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \quad (2.81)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões, que é diretamente ligado às forças internas que tendem a restituir o corpo ao seu equilíbrio. Então, se não houver deformação, não haverá tensão interna.

Figura 2.4: Representação do vetor de tração \mathbf{q} em um meio contínuo de volume V_0 e superfície S_0 devido às forças externas $f_i (i = 1, 2, 3)$.



Fonte: autor, 2023.

2.4.3 Conservação da massa

Podemos definir a massa compreendida por um volume V_0 e superfície S_0 para qualquer intervalo de tempo t como

$$m = \int_{V_0} \rho_1 \, d^3\mathbf{r}, \quad (2.82)$$

onde $\rho_1 = \rho_1(\mathbf{r}, t)$ é a densidade de massa de um sólido. Para termos a conservação de massa, é preciso que a taxa de variação da mesma seja nula, ou seja, $dm/dt = 0$. Logo,

$$\int_{V_0} [\partial_t \rho_1 \, d^3\mathbf{r} + \rho_1 \partial_t (d^3\mathbf{r})] = 0. \quad (2.83)$$

Visto que, o deslocamento de uma partícula provocado pela deformação do volume V_0 , após um instante dt , é dado por $\mathbf{v}dt$, e que \mathbf{n} é o vetor unitário normal à superfície S_0 , então o volume deslocado pelas partículas de um elemento de área $d^2\mathbf{r}$ na superfície S_0

pode ser escrito como $d^3\mathbf{r} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dt d^2\mathbf{r}$. Com isso, obtemos

$$\int_{V_0} \partial_t \rho_1 d^3\mathbf{r} + \int_{S_0} \rho_1 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} = 0. \quad (2.84)$$

Utilizando o teorema da divergência de *Gauss*, Eq. (2.7), convertendo a integral de superfície em uma integral de volume novamente, temos

$$\int_{V_0} \partial_t \rho_1 d^3\mathbf{r} + \int_{V_0} \nabla \cdot \rho_1 \mathbf{v} d^3\mathbf{r} = 0. \quad (2.85)$$

Uma vez que, o volume V_0 é fixo e arbitrário, a equação de conservação de massa é definida como:

$$\partial_t \rho_1 + \nabla \cdot \rho_1 \mathbf{v} = 0, \quad (2.86)$$

a qual é análoga à Eq. (2.12), embora para sólidos.

2.4.4 Conservação do momento

A variação da taxa de momento linear em um meio contínuo de volume V_0 e superfície S_0 é igual à força total aplicada sobre esse volume. Sendo que para um instante de tempo qualquer, t , o momento linear no volume contínuo V_0 é dado por $\rho_1 \mathbf{v}$. Além disso, temos que o corpo também está sujeito a forças de superfície e volumétricas. Dessa forma, a taxa de variação do momento linear de um corpo é estabelecido como

$$\partial_t \int_{V_0} \rho_1 \mathbf{v} d^3\mathbf{r} = \int_{S_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V d^3\mathbf{r}, \quad (2.87)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões em um sólido. Operando a derivada temporal do lado esquerdo da equação, e utilizando a relação apresentada na seção anterior, na qual a derivada no tempo do elemento de volume é $\partial_t(d^3\mathbf{r}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r}$, obtemos

$$\int_{V_0} (\mathbf{v} \partial_t \rho_1 + \rho_1 \partial_t \mathbf{v}) d^3\mathbf{r} + \int_{S_0} \rho_1 \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} = \int_{S_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V d^3\mathbf{r}. \quad (2.88)$$

Por meio da relação da Eq. (2.84) podemos anular o primeiro e o terceiro termo à esquerda da igualdade. Ademais, substituímos $\mathbf{v} = \partial_t \mathbf{w}$ no segundo termo, e empregando o teorema de *Gauss*, Eq. (2.7), na integral de superfície do lado direito, chegamos na equação

$$\int_{V_0} (\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{f}^V) d^3\mathbf{r} = 0. \quad (2.89)$$

Devido o volume V_0 ser arbitrário, a equação de conservação do momento linear para sólidos é definida como

$$\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{f}^V = \mathbf{0}. \quad (2.90)$$

Na maioria dos casos, as forças volumétricas \mathbf{f}^V são muito menores que as demais forças da Eq. (2.90), o que nos permite desprezá-las, restando

$$\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}. \quad (2.91)$$

Assim, está é a equação de conservação de momento linear para sólidos que consideraremos.

2.4.5 Conservação da energia

Temos conservação de energia quando, a taxa de variação de energia total é igual ao trabalho realizado por todas as forças externas ao corpo, por unidade de tempo. Com isso, temos a energia cinética E_c dada por

$$E_c = \frac{1}{2} \int_{V_0} v^2 \rho_1 \, d^3 \mathbf{r}. \quad (2.92)$$

À medida que, a energia interna U é estabelecida como

$$U = \int_{V_0} u \rho_1 \, d^3 \mathbf{r}, \quad (2.93)$$

onde u é a energia interna por unidade de massa. Assim, a conservação de energia é dada por

$$\partial_t \int_{V_0} \left(\frac{1}{2} v^2 + u \right) \rho_1 \, d^3 \mathbf{r} = \int_{S_0} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, d^2 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V \cdot \mathbf{v} \, d^3 \mathbf{r}. \quad (2.94)$$

Efetuada a derivada temporal do lado esquerdo, temos

$$\begin{aligned} & \int_{V_0} \left[(\mathbf{v} \partial_t \mathbf{v} + \partial_t u) \rho_1 + \left(\frac{1}{2} v^2 + u \right) \partial_t \rho_1 \right] d^3 \mathbf{r} + \int_{S_0} \left(\frac{1}{2} v^2 + u \right) \rho_1 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d^2 \mathbf{r} \\ &= \int_{S_0} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, d^2 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V \cdot \mathbf{v} \, d^3 \mathbf{r} \end{aligned} \quad (2.95)$$

Aplicando o teorema de *Guass*, Eq. 2.7, nas integrais de superfície e reordenando alguns termos, obtemos

$$\int_{V_0} (\mathbf{v} \partial_t \mathbf{v} + \partial_t u) \rho_1 \, d^3 \mathbf{r} + \int_{V_0} \left(\frac{1}{2} v^2 + u \right) [\partial_t \rho_1 + \nabla \cdot \rho_1 \mathbf{v}] \, d^3 \mathbf{r} = \int_{V_0} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{v} \, d^3 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V \cdot \mathbf{v} \, d^3 \mathbf{r}. \quad (2.96)$$

Observe que o termo entre colchetes é nulo, já que se trata da equação de conservação de massa, Eq. (2.86). Além disso, se substituirmos $\mathbf{v} = \partial_t \mathbf{w}$ e organizarmos os termos

novamente, temos

$$\int_{V_0} [(\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{f}^V) \partial_t \mathbf{w} + (\rho_1 \partial_t u - \boldsymbol{\sigma} \nabla \cdot \mathbf{v})] d^3 \mathbf{r} = \mathbf{0}. \quad (2.97)$$

onde o primeiro parenteses também é nulo, pois corresponde à equação de conservação do momento, Eq. (2.89). Por fim, como o volume V_0 é arbitrário, encontramos a equação de conservação da energia para sólidos:

$$\rho_1 \partial_t u - \boldsymbol{\sigma} \nabla \cdot \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (2.98)$$

2.5 Propagação de ondas acústicas em sólidos elásticos

A rigidez é uma característica relevante dos materiais elásticos, a qual associa a tensão com a deformação, ao descrever a resistência de um material à deformação em virtude da aplicação de um força. Considerando um meio isotrópico, *Cauchy* generalizou a lei de *Hooke*, adotando que as componentes da tensão são linearmente conectadas às componentes da deformação [Bedford e Drumheller 1994]. Assim, a equação tensorial na notação de *Einstein*, onde um índice repetido corresponde a um somatório sobre esse mesmo índice, pode ser definido como:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl}, \quad (2.99)$$

onde o σ_{ij} é o tensor de tensões, ϵ_{kl} é o tensor de deformação e C_{ijkl} é o tensor das constantes elásticas, ou módulos do material, assim sendo denominado de tensor do módulo de elasticidade.

A equação acima pode ser desenvolvida por meio do teorema que se segue: Um tensor isotrópico de quarta ordem D_{ijkl} pode ser escrito da seguinte forma [Segel 2007],

$$D_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \kappa (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}), \quad (2.100)$$

onde λ , μ e κ são constantes e δ_{nm} ($n, m = i, j, k, j$) é a função delta de *Kronecker*. Com isso, utilizando esse teorema no tensor de quarta ordem da relação tensão-deformação para um meio isotrópico, Eq. (2.99), temos

$$\sigma_{ij} = \lambda_e \delta_{ij} \epsilon_{kk} + 2\mu_e \epsilon_{ij}, \quad (2.101)$$

ou ainda,

$$\boldsymbol{\sigma} = [\lambda_e \text{tr } \boldsymbol{\epsilon}] \mathbf{I} + 2\mu_e \boldsymbol{\epsilon}, \quad (2.102)$$

onde, \mathbf{I} é o tensor unitário de segunda ordem, ‘tr’ representa o traço de um tensor, λ_e e μ_e são as constantes elásticas longitudinal e de cisalhamento em unidades Pa.

Aplicando o tensor de deformação da Eq. (2.79) e a relação de tensão-deformação para

um sólido elástico isotrópico, Eq. (2.101), na equação da conservação do momento, Eq. (2.91), conseguimos reestruturar essa relação em termos do deslocamento w , da seguinte forma:

$$\rho_1 \partial_t^2 w_i = (\lambda_e + \mu_e) \partial_{ij}^2 w_j + \mu_e \partial_j^2 w_i \quad (2.103)$$

Ou de maneira equivalente, em formato vetorial

$$\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} = (\lambda_e + \mu_e) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{w}) + \mu_e \nabla^2 \mathbf{w}. \quad (2.104)$$

Ao passo, se empregarmos a identidade vetorial $\nabla^2 \mathbf{w} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{w}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{w}$, a equação acima pode ser reescrita como

$$\partial_t^2 \mathbf{w} = c_L^2 \nabla(\nabla \cdot \mathbf{w}) - c_S^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{w}. \quad (2.105)$$

De modo que, as velocidades do som longitudinal e de cisalhamento no sólido são definidos como [Ayres e Gaunard 1987]:

$$c_L = \sqrt{\frac{(\lambda_e + 2\mu_e)}{\rho_1}}, \quad (2.106)$$

$$c_S = \sqrt{\frac{\mu_e}{\rho_1}}. \quad (2.107)$$

2.5.1 Decomposição de Helmholtz

Devido a natureza complexa da equação de movimento do deslocamento, Eq. (2.105), é válido reescrevermos essa equação de uma forma mais concisa, com essa finalidade, usaremos o teorema da decomposição de Helmholtz [GRAFF 1975], para definir o vetor de deslocamento \mathbf{w} em termos do potencial escalar ϕ_L e do potencial vetor \mathbf{A} ,

$$\mathbf{w} = (\nabla \phi_L + \nabla \times \mathbf{A}) e^{-i\omega t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \quad (2.108)$$

onde ϕ_L e \mathbf{A} são as amplitudes das funções potenciais escalar e vetor referentes às ondas longitudinais e de cisalhamento, nessa ordem. Com isso, a Eq. (2.105) torna-se,

$$\nabla [\partial_t^2 \phi_L - c_L^2 \nabla^2 \phi_L] e^{-i\omega t} + \nabla \times [\partial_t^2 \mathbf{A} - c_S^2 \nabla^2 \mathbf{A}] e^{-i\omega t} = 0. \quad (2.109)$$

Dessa forma, para satisfazer essa equação, os termos entre colchetes devem ser nulos, de modo que as equações de onda em um sólido podem ser escritas de forma independente para cada potencial,

$$[\nabla^2 - c_L^{-2} \partial_t^2] \phi_L e^{-i\omega t} = 0, \quad (2.110)$$

$$[\nabla^2 - c_S^{-2} \partial_t^2] \mathbf{A} e^{-i\omega t} = 0. \quad (2.111)$$

Como a função potencial \mathbf{A} é um campo vetorial solenoidal, podemos reescrevê-la em termos de dois potenciais escalares $\psi_{S,1}$ e $\psi_{S,2}$, isto é, os intitulando de potenciais escalares de Debye [Gray e Nickel 1978],

$$\mathbf{A} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi_{S,1}) + \nabla \times \nabla \times (\mathbf{r}\psi_{S,2}). \quad (2.112)$$

Com isso, substituindo esse nova reformulação do potencial na Eq. (2.111), chegamos nas equações de Helmholtz escalares

$$(\nabla^2 + k_L^2)\phi_L = 0, \quad (2.113)$$

$$(\nabla^2 + k_S^2) \begin{pmatrix} \psi_{S,1} \\ \psi_{S,2} \end{pmatrix} = 0. \quad (2.114)$$

onde k_L e k_S são os números de onda longitudinal e de cisalhamento, nessa ordem, dados por

$$k_j^2 = \left(\frac{\omega}{c_j} \right)^2, \quad j \in \{L, S\}, \quad (2.115)$$

Já apresentamos uma solução da equação de Helmholtz na Sec. 2.3.3. Como as amplitudes dos potenciais dentro da partícula deve ser funções regulares finitas, os potenciais longitudinal e de cisalhamento de Debye são escritos na base de ondas parciais como

$$\phi_L(k_L r, \theta, \varphi) = \sum_{n,m} d_{nm} a_{nm} j_n(k_L r) Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (2.116)$$

$$\psi_{S,1}(k_S r, \theta, \varphi) = \sum_{n,m} e_{nm} a_{nm} j_n(k_S r) Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (2.117)$$

$$\psi_{S,2}(k_S r, \theta, \varphi) = \sum_{n,m} f_{nm} a_{nm} j_n(k_S r) Y_n^m(\theta, \varphi). \quad (2.118)$$

onde, os coeficientes de expansão d_{nm} , e_{nm} e f_{nm} serão estipulados por meio da resolução do sistema linear obtido através das condições de contorno na superfície da partícula.

3

Força e torque de radiação acústica

Enquanto se propagam, as ondas acústicas transportam energia e momento (linear e/ou angular), ao interagir com um dado objeto parte desse momento pode ser transferido para o mesmo, conforme a onda é espalhada e absorvida pelo objeto. De modo que o fluxo de momento linear médio e as tensões que atuam sobre o objeto, são reconhecidas como a força de radiação acústica, e de forma análoga, o fluxo de momento angular origina o torque de radiação acústica. Assim, neste capítulo, veremos como a força e o torque de radiação acústica em uma dada partícula são definidos em função dos campos de pressão e velocidade apresentados no capítulo anterior (Cap. 2). Posteriormente, apresentamos os efeitos de força e torque de radiação acústica devido a interação não linear de uma partícula esferoidal de subcomprimento de onda com uma onda acústica arbitrária. Em seguida, expomos um caso particular de transferência de spin de um feixe de Bessel com vorticidade de primeira ordem para uma partícula esferoidal. E posteriormente, detalharemos uma teoria de obtenção dos campos acústicos médios para uma partícula axissimétrica de subcomprimento qualquer.

3.1 Força de radiação por um feixe aleatório

Considerando uma onda incidente em uma partícula de superfície S_0 , a força de radiação acústica média \mathbf{F}_{rad} será computada pela integral do tensor de tensões médio $\bar{\mathbf{S}}$ que atua sobre a partícula:

$$\mathbf{F}_{rad} = \int_{S_0} \bar{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n} \, d^2\mathbf{r}, \quad (3.1)$$

onde a barra indica a média temporal (ver Sec. 2.1).

Apresentaremos os termos da força de radiação acústica até segunda ordem. Normalmente, os campos de segunda ordem são considerados desprezíveis em comparação com os termos de primeira ordem. No entanto, quando os campos lineares tem uma dependência harmônica com o tempo, eles tem média temporal nula. Por exemplo, se os termos de primeira ordem (como a pressão, ou a velocidade do fluido, por exemplo) forem funções de

$\sin \omega t$ ou $\cos \omega t$, por meio da Eq. (2.1) obtemos $\overline{\sin \omega t} = 0$ e $\overline{\cos \omega t} = 0$. Por outro lado, as funções do produto de termos de primeira ordem, não produzem obrigatoriamente médias temporais nulas, como por exemplo $\overline{\cos^2 \omega t} = 1/2$ e $\overline{\sin^2 \omega t} = 1/2$.

Dessa forma, considerando a aproximação de segunda ordem, Eqs. (2.34)-(2.36), o tensor de tensão de radiação médio, Eq. (2.16), de segunda ordem é definido como

$$\overline{\mathbf{S}^{(2)}} = \overline{p^{(2)}} \mathbf{I} + \rho_0 \overline{\mathbf{v}^{(1)} \mathbf{v}^{(1)}}, \quad (3.2)$$

onde $p^{(2)}$ é a pressão de segunda ordem, e $v^{(1)}$ é a velocidade de primeira ordem. Por sua vez, os campos acústicos na aproximação de segunda ordem das Eqs. (2.34)-(2.36), são

$$p = p_0 + \mathcal{M}p^{(1)} + \mathcal{M}^2 p^{(2)}, \quad (3.3)$$

$$\rho = \rho_0 + \mathcal{M}\rho^{(1)} + \mathcal{M}^2 \rho^{(2)}, \quad (3.4)$$

$$\mathbf{v} = \mathcal{M}\mathbf{v}^{(1)} + \mathcal{M}^2 \mathbf{v}^{(2)}. \quad (3.5)$$

Combinando as Eqs. (3.3)-(3.5) com a Eq. (2.23), obtemos a equação do movimento de segunda ordem para o campo acústico

$$\rho_0 \partial_t \mathbf{v}^{(2)} = -\nabla p^{(2)} - \rho^{(1)} \partial_t \mathbf{v}^{(1)} - \rho_0 (\mathbf{v}^{(1)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(1)}. \quad (3.6)$$

Note que, os dois últimos termos da Eq. (3.6) são produtos de dois campos de primeira ordem. Logo, tomando a média temporal da Eq. (3.6) (ver Sec. (2.1)), obtemos

$$\nabla \overline{p^{(2)}} = -\overline{\rho^{(1)} \partial_t \mathbf{v}^{(1)}} - \overline{\rho_0 (\mathbf{v}^{(1)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(1)}}. \quad (3.7)$$

Ou, em termos do potencial de velocidade, Eq. (2.44),

$$\nabla \overline{p^{(2)}} = -\overline{\rho^{(1)} \partial_t \nabla \phi} - \overline{\rho_0 \nabla \phi \cdot \nabla \nabla \phi}, \quad (3.8)$$

onde,

$$\nabla \phi \cdot \nabla \nabla \phi = \frac{1}{2} \nabla (\nabla \phi \cdot \nabla \phi) = \nabla \left(\frac{v^{(1)2}}{2} \right). \quad (3.9)$$

Ademais, utilizando as aproximações de primeira ordem Eqs. (2.40) e (2.45), obtemos a equação da pressão de segunda ordem, em termos de primeira ordem,

$$\overline{p^{(2)}} = \frac{\overline{p^{(1)2}}}{2\rho_0 c_0^2} - \frac{\rho_0 \overline{v^{(1)2}}}{2}, \quad (3.10)$$

onde $v^{(1)2} = \mathbf{v}^{(1)} \cdot \mathbf{v}^{(1)}$. Logo, substituindo a Eq. (3.10) na Eq. (3.2), temos o tensor de

tensões médio, também em termos dos campos acústicos de primeira ordem

$$\overline{\mathbf{S}^{(2)}} = \left(\frac{\overline{p^{(1)^2}}}{2\rho_0 c_0^2} - \frac{\rho_0 \overline{v^{(1)^2}}}{2} \right) \mathbf{I} + \rho_0 \overline{\mathbf{v}^{(1)} \mathbf{v}^{(1)}}. \quad (3.11)$$

onde o termo entre parênteses (com sinais trocados) é reconhecido como a média da *Lagrangiana* acústica de segunda ordem,

$$\overline{\mathcal{L}} = \frac{\rho_0 \overline{v^{(1)^2}}}{2} - \frac{\overline{p^{(1)^2}}}{2\rho_0 c_0^2}, \quad (3.12)$$

uma vez que, o primeiro e segundo termos, após a igualdade, são reconhecidos como as energias acústicas cinética e potencial, nessa ordem.

Enfim, substituindo a Eq. (3.11) na Eq. (3.1), encontramos a equação da força de radiação acústica média de segunda ordem em termos de campos acústicos de primeira ordem:

$$\mathbf{F}^{rad} = \int_{S_0} \left[\left(\frac{\overline{p^{(1)^2}}}{2\rho_0 c_0^2} - \frac{\rho_0 \overline{v^{(1)^2}}}{2} \right) \mathbf{I} + \rho_0 \overline{\mathbf{v}^{(1)} \mathbf{v}^{(1)}} \right] \cdot \mathbf{n} \, d^2 \mathbf{r}, \quad (3.13)$$

Dessa forma, para computar a força de radiação acústica em um objeto, precisamos dos campos totais de pressão e velocidade do fluido na superfície do mesmo. Esses campos são dados pela soma das componentes incidentes e espalhados, isto é, $p = p_{in} + p_{sc}$ e $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{in} + \mathbf{v}_{sc}$, respectivamente, os quais podem ser obtidos resolvendo o espalhamento através da solução da equação diferencial de *Helmholtz* (Eq. 2.48) apresentada, de acordo com as condições de contorno do problema.

3.2 Torque de radiação acústica por um feixe aleatório

As ondas acústicas naturalmente carregam momento linear, o qual é bem definido na teoria de mecânica dos fluidos, por meio da densidade de fluxo de momento linear [Silva 2011], como $\overline{\mathbf{P}} = \overline{\mathcal{L}}\mathbf{I} + \rho_0 \overline{\mathbf{v}\mathbf{v}}$, onde \mathbf{I} representa o tensor unitário e a barra sobrescrita denota a média temporal sobre um período da onda. Por sua vez, \mathcal{L} e $\rho_0 \mathbf{v}\mathbf{v}$ são a lagrangiana acústica e o tensor de tensões de Reynolds, nessa ordem. Assim, a densidade do fluxo de momento angular é estabelecido como $\overline{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \overline{\mathbf{P}}$. Coerentemente, podemos expressar a força de radiação acústica, provocada por uma onda incidente em um elemento de superfície dS da partícula, como $d\mathbf{F}^{rad} = \overline{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{n} \, dS$, onde \mathbf{n} é o vetor unitário externo em dS . Analogamente, podemos representar o torque de radiação acústica infinitesimal por $d\boldsymbol{\tau}^{rad} = \mathbf{r} \times d\mathbf{F}^{rad} = \overline{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{n} \, dS$. Conseqüentemente, o torque de radiação acústica em uma partícula é definido como

$$\boldsymbol{\tau}^{rad} = \int_{S_0} \overline{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{n} \, dS. \quad (3.14)$$

Sabendo que o momento angular obedece a lei de conservação [Zhang e Marston 2011] $\nabla \bar{\mathbf{L}} = 0$, a integral acima pode ser calculada sobre uma superfície S , que não necessariamente seja a superfície da partícula, por exemplo, podendo estar no campo distante $kr \gg 1$, contando que está superfície envolta toda a partícula. Dessa forma, podemos descrever o torque de radiação como $\boldsymbol{\tau}^{rad} = - \int_S (\mathbf{r} \times \rho_0 \bar{\mathbf{v}} \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} \, dS$. Com isso, lembrando que a velocidade total é a soma da velocidade incidente e da espalhada $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{in} + \mathbf{v}_{sc}$, ao substituir a velocidade total na expressão do torque para o campo distante, reconhecendo que $\bar{\mathbf{v}} \mathbf{v} = \frac{1}{2} \text{Re}[\mathbf{v} \mathbf{v}^*]$, chegamos em

$$\boldsymbol{\tau}^{rad} = -\frac{\rho_0 r^2}{2} \text{Re} \left[\int_{\Omega_S} \mathbf{r} \times (\mathbf{v}_{in} \mathbf{v}_{sc}^* + \mathbf{v}_{sc} \mathbf{v}_{in}^* + \mathbf{v}_{sc} \mathbf{v}_{sc}^*) \cdot \mathbf{e}_r \, d\Omega_S \right] \quad (3.15)$$

onde Re representa a parte real do termo, e Ω_S é o ângulo sólido. Note que, sem interação com a partícula não pode haver surgimento de torque de radiação acústica na mesma, logo $\text{Re}[\int_{\Omega_S} \mathbf{r} \times (\mathbf{v}_{in} \mathbf{v}_{in}^*) \cdot \mathbf{e}_r \, d\Omega_S] = \mathbf{0}$. Assim, veremos a seguir como definir os campos acústicos espalhados, necessários para obtenção da força e torque de radiação acústicos.

3.3 Espalhamento acústico

Assumiremos o meio como um fluido descrito por uma densidade ρ_0 , velocidade do som adiabática c_0 e compressibilidade $\beta = 1/\rho_0 c_0^2$. Assim como, partiremos do estudo dos campos acústicos com dependência harmônica, do tipo $e^{-i\omega t}$, sendo $\omega = 2\pi f$ a frequência angular e f a frequência linear, seguindo-se o número de onda $k = \omega/c_0 = 2\pi/\lambda$, com λ simbolizando o comprimento da onda acústica. Deste modo, representaremos a pressão acústica com fase complexa, como $p(\mathbf{r}, t) = p(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$, do mesmo modo a velocidade, como $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$. Além disso, utilizaremos em alguns momentos uma notação indicial, onde em coordenadas cartesianas o vetor posição é $\mathbf{r} = r_i \mathbf{e}_i$ (com $i = x, y, z$) e o vetor velocidade é $\mathbf{v} = v_i \mathbf{e}_i$, com \mathbf{e}_i sendo o vetor unitário cartesiano, dessa forma, assumiremos a soma sobre os índices repetidos. Tal como, também adotaremos $(r_x, r_y, r_z) = (x, y, z)$.

Isto posto, dentro do limite não viscoso a dinâmica das ondas acústicas é bem representada pelas famigeradas equações acústicas lineares (ver Sec. 2.3.1)

$$(\nabla^2 + k^2)p = 0, \quad (3.16a)$$

$$-\frac{i}{\rho_0 c_0 k} \nabla p = \mathbf{v}, \quad (3.16b)$$

$$\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (3.16c)$$

Aqui, por mais clareza das equações ocultamos a dependência temporal $e^{-i\omega t}$. Além disso, obtemos a Eq. (3.16c) ao aplicarmos o rotacional na Eq. (3.16b).

Ao introduzirmos uma inclusão no meio de propagação da onda incidente, como uma

partícula, ocorre o espalhamento desta onda pela inclusão. Dessa forma, agora além da onda incidente temos a onda espalhada.

Para a onda incidente, estamos buscando a solução de uma onda que se propaga por uma extensão que engloba a origem do sistema de coordenadas, por esse motivo a solução deve ser regular na origem, ou seja, deve permanecer finita na região de propagação.

Por outro lado, a região de propagação da onda espalhada não inclui a origem do sistemas de coordenadas. Além disso, a amplitude da onda espalhada (p_{sc}) deve obedecer a condição de radiação de Sommerfeld no infinito,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r(\partial_r - ik)p_{sc} = 0. \quad (3.17)$$

Visto que, esta condição estabelece que a onda espalhada não deve ser refletida no infinito. Salientando, que a condição de radiação é caracterizada por uma solução que contempla apenas as ondas "de saída".

Assim, de acordo com a solução da Equação de *Helmholtz*, Eq. (2.72-2.73), podemos definir os campos de pressão incidente e a pressão espalhada (e conseqüentemente os campos de velocidades através da Eq.(3.16b)) por meio de expansões em ondas parciais, em coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) , como

$$p_{in} = p_0 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n a_{nm} j_n(kr) Y_n^m(\theta, \phi), \quad (3.18a)$$

$$p_{sc} = p_0 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n a_{nm} s_{nm} h_n(kr) Y_n^m(\theta, \phi), \quad (3.18b)$$

onde p_0 é a pressão de pico, j_n é a função esférica de Bessel de ordem n , h_n é a função de Hankel do primeiro tipo e de ordem n , Y_n^m são os harmônicos esféricos de ordem n e grau m , a_{nm} é denominado como coeficiente de forma do feixe incidente, e o coeficiente de espalhamento s_{nm} depende da partícula espalhadora.

Geralmente a partícula é tida como sendo muito menor que o comprimento da onda, pois assim, apenas os modos de monopolo ($n = 0$) e dipolo ($n = 1$) da expansão da Eq. (3.18b) são suficientes para descrever o espalhamento acústico [Pierce 2019]. Com isso, o parâmetro de expansão da aproximação de ondas longas, em comparação com a partícula, é definido como

$$\epsilon = ka \ll 1, \quad (3.19)$$

onde, a é a maior distância radial à superfície da partícula.

3.3.1 Coeficiente de forma do feixe incidente

Para determinamos o coeficiente de forma do feixe incidente, partindo da Eq. (3.18a), devemos multiplicar a equação da pressão incidente por $Y_{m'}^{n'*}$ ao integrarmos o resultado

sobre uma esfera unitária, assim utilizando a relação de ortogonalidade dos harmônicos esféricos

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_m^n(\theta, \phi) Y_{m'}^{n'*}(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \delta_{nn'} \delta_{mm'}, \quad (3.20)$$

onde δ_{nm} é a função delta de Kronecker, obtemos [Silva 2011]

$$a_{nm} = \frac{1}{p_0 j_n(kr)} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} p_{in}(kr, \theta, \phi) Y_m^{n*}(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi, \quad (3.21)$$

com o asterisco simbolizando o complexo conjugado. Dado que, podemos calcular o coeficiente de forma do feixe incidente em qualquer distância kr , então é possível associá-lo a pressão acústica avaliada na origem do sistema de coordenadas da partícula $\mathbf{r} = 0$. É previsto que a força de radiação acústica depende do coeficiente de forma do feixe para a aproximação de quadripolo [Silva 2014]. Deste modo, truncaremos a expansão em séries de Taylor da pressão incidente em torno de $\mathbf{r} = 0$ como

$$p_{in}(\mathbf{r}) = p_{in}(\mathbf{0}) + r_i \partial_i p_{in}|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} + \frac{1}{2!} r_i r_j \partial_i \partial_j p_{in}|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}}, \quad (3.22)$$

com $i, j = x, y, z$. Assim, também utilizaremos a expansão assintótica da função de Bessel esférica com $r \rightarrow 0$,

$$j_n(kr) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2^{n+1} \Gamma(n + 3/2)} (kr)^n, \quad (3.23)$$

onde $\Gamma(n)$ é a função gamma. Enfim, empregando as expansões dispostas nas Eqs. (3.22) e (3.23), na Eq. (3.21), e avaliando as integrais com $r_x = r \sin \theta \cos \phi$, $r_y = r \sin \theta \sin \phi$, e $r_z = r \cos \theta$, obtemos o coeficiente de forma do feixe até a quarta ordem do quadripolo,

$$a_{00} = \frac{\sqrt{4\pi}}{p_0} p_{in}, \quad (3.24a)$$

$$a_{10} = 2i\sqrt{3\pi} \frac{\rho_0 c_0}{p_0} v_{in,z}, \quad (3.24b)$$

$$a_{1,\pm 1} = i\sqrt{6\pi} \frac{\rho_0 c_0}{p_0} (\mp v_{in,x} + i v_{in,y}), \quad (3.24c)$$

$$a_{20} = -i\sqrt{5\pi} \frac{\rho_0 c_0}{k p_0} (\partial_x v_{in,x} + \partial_y v_{in,y} - 2\partial_z v_{in,z}), \quad (3.24d)$$

$$a_{2,\pm 1} = i\sqrt{30\pi} \frac{\rho_0 c_0}{k p_0} (\mp \partial_z v_{in,x} + i \partial_z v_{in,y}), \quad (3.24e)$$

$$a_{2,\pm 2} = i\sqrt{\frac{15\pi}{2}} \frac{\rho_0 c_0}{k p_0} (\partial_x v_{in,x} - \partial_y v_{in,y} \mp 2i \partial_x v_{in,y}). \quad (3.24f)$$

$$(3.24g)$$

Onde foi considerado, durante a derivação, que o fluido é irrotacional, Eq. (3.16c). Resaltamos que os campos acústicos da Eq. (3.24) são avaliados em $\mathbf{r} = \mathbf{0}$.

Até este ponto, apresentamos os temas da maneira mais abrangente possível, entre-

tanto nas próximas seções trataremos de casos que dependem explicitamente das condições de contorno do problema acústico abordado.

3.4 Interação não linear de ondas acústicas com uma partícula esferoidal: Efeitos de força e torque de radiação

A partícula que utilizaremos em nosso estudo é um esferoide prolato de diâmetro maior $2a$ e menor $2b$, centrado no sistema de coordenadas da partícula (x, y, z) . É conveniente, que a superfície da partícula seja descrita em coordenadas esferoidais prolatas, sendo sua transformação para o sistema cartesiano dada por,

$$x = \frac{d}{2} \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos \phi, \quad (3.25a)$$

$$y = \frac{d}{2} \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \sin \phi, \quad (3.25b)$$

$$z = \frac{d\xi\eta}{2}, \quad (3.25c)$$

com $\xi \geq 1$ sendo a coordenada radial esferoidal, $-1 \leq \eta \leq 0$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$ o ângulo azimutal, e a distância interfocal dada por

$$d = 2\sqrt{a^2 - b^2}. \quad (3.26)$$

Dessa forma, a superfície da partícula é delimitada por

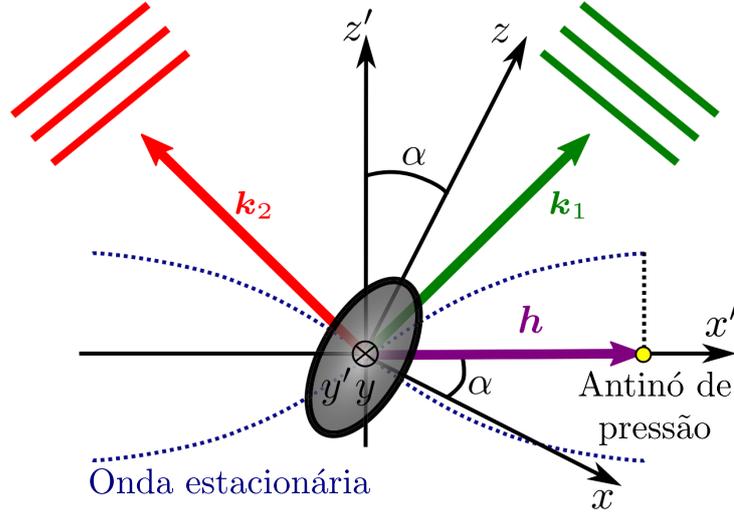
$$\xi = \xi_0 = \left[1 - \left(\frac{b}{a} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (3.27)$$

configurando ξ_0 como o parâmetro geométrico da partícula. Além disso, estabelecemos a orientação da partícula com a direção z , logo $\mathbf{d} = d\mathbf{e}_z$. Ademais, podemos recuperar a esfera de raio r_0 fazendo

$$d \rightarrow 0, \xi_0 \rightarrow \infty, \frac{\xi_0 d}{2} \rightarrow r_0. \quad (3.28)$$

Contudo, analisaremos o comportamento da partícula em um sistema fixo de laboratório identificado pelas coordenadas com linha “ ’ ”, por exemplo (x', y', z') . Assim, nesse referencial a orientação da partícula é determinada em função de um ângulo α , dada por $\mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_{z'} = d \cos \alpha$ (ver, Fig. 3.1).

Figura 3.1: Duas ondas planas cruzadas formando um ângulo reto, interagindo com uma partícula esferoidal no plano $x'z'$ (referencial de laboratório). O referencial da partícula é denotado pelos eixos x , y e z , de modo que a orientação da partícula no plano $x'z'$ é dada por um ângulo α entre os eixos z e z' . Os eixos y e y' estão orientados para dentro do plano de visualização. Os vetores de onda k_1 e k_2 estão representados por setas verdes e vermelhas. E o vetor h , seta roxa, aponta do centro da partícula para um antinó de pressão transversal.



Fonte: [Lima et al. 2020].

3.4.1 Coeficientes de espalhamento para um esferoide rígido

Adotaremos o limite em que a partícula é muito menor que o comprimento da onda, de modo a utilizarmos apenas os coeficientes de monopolo e dipolo da expansão da Eq. (3.18b). Neste caso, definimos o parâmetro de expansão da aproximação de ondas longas, em comparação com a partícula, como

$$\epsilon = \frac{\xi_0 kd}{2} = ka \ll 1. \quad (3.29)$$

Como também consideraremos a partícula como um corpo rígido, aplicaremos a condição de contorno na superfície da partícula que anula a componente normal da velocidade total do fluido, ou seja, tanto a contribuição incidente quanto a de espalhamento da velocidade, devem se extinguir na superfície S_0 da partícula,

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}|_{r \in S_0} = 0, \quad (3.30)$$

com \mathbf{n} sendo o vetor unitário normal apontando para fora da superfície S_0 .

Com isso, podemos encontrar o coeficiente de espalhamento por meio da expansão em ondas parciais ao empregarmos a condição de contorno de corpo rígido na Eq. (3.18b), devido a simetria da partícula, isto é mais facilmente executado, ao utilizarmos as expressões

em coordenadas esferoidais prolatas (ξ, η, θ) , dessa forma, podemos obter os coeficientes de monopolo e dipolo de um esferoide rígido como [Silva e Drinkwater 2018]

$$s_{00} = \frac{i\epsilon^3}{3} f_{00} - \frac{\epsilon^6}{9} f_{00}^2, \quad (3.31a)$$

$$s_{10} = \frac{i\epsilon^3}{6} f_{10} - \frac{\epsilon^6}{36} f_{10}^2, \quad (3.31b)$$

$$s_{1,-1} = s_{11} = \frac{i\epsilon^3}{12} f_{11} - \frac{\epsilon^6}{144} f_{11}^2, \quad (3.31c)$$

sendo que, os fatores de espalhamento são dados por

$$f_{00} = 1 - \xi_0^{-2}, \quad (3.32a)$$

$$f_{10} = \frac{2}{3} \left[\frac{\xi_0}{\xi_0^2 - 1} - \ln \frac{\xi_0 + 1}{\sqrt{\xi_0^2 - 1}} \right]^{-1}, \quad (3.32b)$$

$$f_{11} = \frac{8}{3} \left[\frac{2 - \xi_0^2}{\xi_0(\xi_0^2 - 1)} + \ln \frac{\xi_0 + 1}{\sqrt{\xi_0^2 - 1}} \right]^{-1}, \quad (3.32c)$$

Note que, essas expressões dependem somente do fator geométrico ξ_0 , e os coeficientes dipolares de modo perpendiculares à direção axial ($s_{1,-1}$ e s_{11}) são degenerados, em virtude da simetria axial da partícula. Além disso, podemos recuperar os fatores de espalhamento de uma partícula esférica fazendo $\xi_0 \rightarrow \infty$ na Eq. (3.32), gerando

$$f_{00} = 1, \quad f_{10} = 1, \quad f_{11} = 2. \quad (3.33)$$

E conseqüentemente, ao substituirmos esses fatores na Eq. (3.31), recuperamos também os coeficientes de espalhamento de dipolo da partícula esférica, como presumível, todos degenerados

$$s_{10} = s_{1,-1} = s_{11}. \quad (3.34)$$

3.4.2 Força de radiação acústica para um esferoide rígido de sub-comprimento de onda

Para uma partícula esferoidal rígida muito menor que o comprimento de onda, $\epsilon \ll 1$, as componentes cartesianas da força de radiação acústica são obtidas ao substituirmos os campos totais de pressão (Eq. (3.18)) e velocidade do fluido (Eq. (3.16b)) em função dos coeficientes de forma (Eq. (3.24)) e de espalhamento (Eq. (3.32)), na Eq. (3.13), assim

temos [Silva e Drinkwater 2018]

$$\begin{aligned}
 F_x + iF_y = i\frac{E_0}{2k^2} \left\{ \sqrt{\frac{2}{3}}[a_{00}^*a_{1,-1}(s_{00}^* + s_{11} + 2s_{00}^*s_{11}) + a_{00}a_{11}^*(s_{00} + s_{11}^* + 2s_{11}^*s_{00})] + \right. \\
 + \sqrt{\frac{2}{5}}[a_{10}a_{21}^*s_{10} + a_{2,-1}a_{10}^*s_{10}^* + \sqrt{2}(a_{11}a_{22}^*s_{11} + a_{2,-2}a_{1,-1}^*s_{11}^*)] + \\
 \left. + \sqrt{\frac{2}{15}}[a_{20}^*s_{11}a_{1,-1} + a_{20}a_{11}^*s_{11}^*] \right\}, \quad (3.35a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F_z = \frac{E_0}{k^2} \operatorname{Im} \left[\frac{2}{\sqrt{15}}a_{10}a_{20}^*s_{10} + \frac{1}{\sqrt{5}}(a_{1,-1}a_{2,-1}^* + a_{11}a_{21}^*)s_{11} + \right. \\
 \left. + \frac{1}{\sqrt{3}}a_{00}a_{10}^*(s_{00} + s_{10}^* + 2s_{00}^*s_{10}^*) \right], \quad (3.35b)
 \end{aligned}$$

com $E_0 = \beta_0 p_0^2/2$ sendo a densidade de energia característica da onda incidente.

Portanto, se substituirmos os coeficientes de forma do feixe, Eq. (3.24), e de espalhamento, Eq. (3.31), na Eq. (3.35), podemos obter a força de radiação em função dos campos incidentes. Assim, utilizando a equação de Helmholtz para a pressão incidente $\partial_i \partial_i p_{in} = -k^2 p_{in}$ e reorganizando os termos encontramos

$$\mathbf{F}^{rad} = -\pi a^3 \operatorname{Re}[\beta_0(\mathbf{Q}_{grad}^* - i\epsilon^3 \mathbf{Q}_{sca}^*) \cdot \nabla p_{in} + \rho_0(\mathbf{D}_{grad}^* - i\epsilon^3 \mathbf{D}_{sca}^*) \cdot \nabla \mathbf{v}_{in}]_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} \quad (3.36a)$$

$$= \mathbf{F}^{grad} + \mathbf{F}^{sca}, \quad (3.36b)$$

onde os momentos de monopolo e dipolo da partícula são dados por

$$\mathbf{Q}_{grad} = \frac{2}{3}f_{00}p_{in}(0)\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i, \quad (3.37a)$$

$$\mathbf{Q}_{sca} = -\frac{f_{00}}{9}p_{in}(0)[(2f_{00} + f_{11})(\mathbf{e}_x\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y\mathbf{e}_y) + 2(f_{00} + f_{10})\mathbf{e}_z\mathbf{e}_z], \quad (3.37b)$$

$$\mathbf{D}_{grad} = -\frac{f_{11}}{2}[v_{in,x}(0)\mathbf{e}_x + v_{in,y}(0)\mathbf{e}_y] - f_{10}v_{in,z}(0)\mathbf{e}_z, \quad (3.37c)$$

$$\mathbf{D}_{sca} = -\frac{1}{6} \left[\frac{f_{11}^2}{2}[v_{in,x}(0)\mathbf{e}_x + v_{in,y}(0)\mathbf{e}_y] + f_{10}^2 v_{in,z}(0)\mathbf{e}_z \right], \quad (3.37d)$$

onde $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j$ é uma díade, que forma a base cartesiana de um tensor de segunda ordem. Note que, podemos dividir a força de radiação em duas partes, sendo a força devido o espalhamento \mathbf{F}^{sca} oriunda da auto-interação com a onda espalhada, e a força gradiente \mathbf{F}^{grad} proveniente da interação com a onda incidente e espalhada. Podemos ver também, que \mathbf{F}^{grad} é bem maior que \mathbf{F}^{sca} , por um fator de ϵ^3 . Além disso, podemos expressar a

força gradiente de uma forma mais familiar, fazendo

$$\mathbf{F}^{grad} = -\nabla U(0), \quad (3.38a)$$

$$U = \pi a^3 \left[\frac{\beta_0 f_{00}}{3} |p_{in}|^2 - \frac{\rho_0}{2} \left(\frac{f_{11}}{2} (|v_{in,x}|^2 + |v_{in,y}|^2) + f_{10} |v_{in,z}|^2 \right) \right]. \quad (3.38b)$$

Se considerarmos a onda incidente como uma onda estacionária, a amplitude de pressão p_{in} é uma função de valor real, que resulta em ∇p_{in} e \mathbf{Q}_{sca}^* como quantidades reais também. Logo, $\text{Re}[i\mathbf{Q}_{sca}^* \cdot \nabla p_{in}] = \mathbf{0}$ e $\text{Re}[i\mathbf{D}_{sca}^* \cdot \nabla \mathbf{v}_{in}] = \mathbf{0}$, restando somente a força gradiente.

Por outro lado, se considerarmos ondas propagantes, as quais possuem amplitude complexa, tomando uma onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, isto implica em um operador gradiente dado por $\nabla \rightarrow i\mathbf{k}$, e conseqüentemente $F^{grad} = \mathbf{0}$.

É válido ressaltar a familiaridade da Eq. (3.38), onde podemos recuperar facilmente, ver Eq. (3.33), a força de radiação de uma esfera rígida obtida na Ref. [Gor'kov 1962], sendo que o limite de uma partícula rígida é alcançado ao assumirmos a partícula com compressibilidade e densidade infinitas.

3.4.3 Torque de radiação acústico para um esferoide rígido de subcomprimento de onda

De forma análoga à força, para uma partícula esferoidal rígida muito menor que o comprimento de onda, $\epsilon \ll 1$, as componentes cartesianas do torque de radiação acústica, Eq. (3.15), são obtidas como [Leão-Neto, Lopes e Silva 2020]

$$\tau_x = -\frac{E_0}{k^3 \sqrt{2}} \text{Re}[(a_{1,-1} + a_{11})(1 + s_{11})a_{10}^* s_{10}^* + (a_{1,-1}^* + a_{11}^*)(1 + s_{10})a_{10} s_{11}^*], \quad (3.39a)$$

$$\tau_y = \frac{E_0}{k^3 \sqrt{2}} \text{Re}[i(a_{1,-1} - a_{11})(1 + s_{11})a_{10}^* s_{10}^* - i(a_{1,-1}^* - a_{11}^*)(1 + s_{10})a_{10} s_{11}^*], \quad (3.39b)$$

$$\tau_z = \frac{E_0}{k^3} \text{Re}[(|a_{1,-1}|^2 - |a_{11}|^2)(1 + s_{11})s_{11}^*]. \quad (3.39c)$$

$$(3.39d)$$

Ao reformularmos o torque em função da onda incidente, iremos reescrevê-lo em termos do tensor de fluxo de momento e da densidade de spin acústico [Bliokh e Nori 2019], sendo os mesmos dados, nesta ordem, por

$$\mathbf{P} = \frac{\rho_0}{2} \text{Re}[\mathbf{v}_{in} \mathbf{v}_{in}^*], \quad (3.40a)$$

$$\mathbf{S} = \frac{\rho_0}{2\omega} \text{Im}[\mathbf{v}_{in}^* \times \mathbf{v}_{in}]. \quad (3.40b)$$

Assim, substituímos os coeficientes de forma, Eq. (3.24), e os coeficientes de espalhamento, Eq. (3.31), na Eq. (3.39), ao reorganizarmos os termos, além de utilizarmos a

Eq. (3.40), obtemos o torque de radiação acústica em termos do feixe incidente

$$\boldsymbol{\tau}^{rad} = -\pi a^3 \left[\chi [\mathbf{e}_z \times \mathbf{P}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{e}_z] - \frac{\epsilon^3}{24} \chi^2 \omega \mathbf{S}_\perp(\mathbf{0}) \right], \quad (3.41)$$

com $\chi = f_{11} - 2f_{10}$ sendo o fator de diferença dos dipolo, e $\mathbf{S}_\perp = S_x \mathbf{e}_x + S_y \mathbf{e}_y$ a densidade de spin acústico transversal. Além disso, é bom salientar que $(\mathbf{P} \cdot \mathbf{e}_z)_i = (\rho_0/2) \text{Re}[\mathbf{v}_{in,i} \mathbf{v}_{in,z}^*]$.

Podemos notar na Eq. (3.41), que o primeiro termo do torque não depende diretamente da frequência, estando relacionado ao fluxo de momento linear \mathbf{P} aplicado ao longo da direção axial (eixo z). Ao passo que, o segundo termo da equação tem uma dependência explícita com a frequência, variando com até a terceira potência ω^3 , sendo este o torque induzido pelo spin, que é uma fração do torque bem menor que a primeira oriunda do momento.

Ademais, conforme a partícula se aproxima de uma esfera ($\xi_0 \rightarrow \infty$), o fator de diferença dos dipolos vai a zero $\chi = 0$, como é fácil ver por meio da Eq. (3.33), com isso, o torque também desaparece, como esperado [Silva, Lobo e Mitri 2012]. E ainda, se substituirmos os fatores de dipolo da Eq. (3.32) em $\chi = f_{11} - 2f_{10}$, e variarmos ξ_0 , identificamos que χ é sempre positivo, tem valor máximo quando $\xi_0 = 1.3181$, e desaparece (e conseqüentemente o torque também) não só quando a partícula se aproxima de uma esfera, como também quando se aproxima de uma linha fina ($\xi_0 \rightarrow 1$).

3.4.4 Demonstração com ondas planas cruzadas

Utilizaremos como comprovação do que foi desenvolvido, a interação de duas ondas planas cruzadas com um ângulo reto entre os vetores de onda delas, e um esferoide com dimensões de subcomprimento de onda (ver Fig. 3.1). A escolha desse feixe se deu pela conveniência do mesmo dispor não somente o spin acústico [Shi et al. 2019], como também conter a geração simultânea de uma onda plana propagante e uma onda estacionada. Assim, os vetores de onda, no sistema de coordenadas de laboratório (distinguido por “ ’ ”), para as ondas incidentes, são dadas por

$$\mathbf{k}'_1 = \frac{k\sqrt{2}}{2} (\mathbf{e}_{x'} + \mathbf{e}_{z'}), \quad (3.42a)$$

$$\mathbf{k}'_2 = \frac{k\sqrt{2}}{2} (\mathbf{e}_{x'} - \mathbf{e}_{z'}). \quad (3.42b)$$

Proporcionando um campo de pressão, expresso por,

$$\begin{aligned} p_{in} &= \frac{p_0}{2} \left[e^{i\mathbf{k}'_1 \cdot (\mathbf{r}' + \mathbf{h}')} + e^{i\mathbf{k}'_2 \cdot (\mathbf{r}' + \mathbf{h}')} \right] \\ &= p_0 \cos \left[\frac{k}{\sqrt{2}} (x' + h) \right] e^{ikz'}. \end{aligned} \quad (3.43a)$$

Onde podemos ver com clareza, que a interferência das ondas resulta em uma onda estacionária ao longo da direção transversal (eixo x') e uma onda propagante na direção axial (eixo z'). Além disso, o vetor deslocamento $\mathbf{h}' = h\mathbf{e}'_x$ nos dá a posição do antinó de pressão mais próximo, em relação ao centro da partícula, na direção transversal.

Podemos obter os vetores de onda no sistema de coordenadas da partícula, por meio da matriz de rotação (no sentido horário) em torno do eixo y' ,

$$\mathbf{R}_{y'}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & -\sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Deste modo, aplicando a matriz de rotação na Eq. (3.42), obtemos

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{R}_{y'}(\alpha)\mathbf{k}'_1 = \frac{k}{\sqrt{2}}[(\cos \alpha - \sin \alpha)\mathbf{e}_x + (\cos \alpha + \sin \alpha)\mathbf{e}_z], \quad (3.45a)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{R}_{y'}(\alpha)\mathbf{k}'_2 = -\frac{k}{\sqrt{2}}[(\cos \alpha + \sin \alpha)\mathbf{e}_x - (\cos \alpha - \sin \alpha)\mathbf{e}_z]. \quad (3.45b)$$

Do mesmo modo, obtemos o parâmetro de deslocamento como $\mathbf{h} = h(\cos \alpha \mathbf{e}_x - \sin \alpha \mathbf{e}_z)$. Com isso, temos a pressão incidente no sistema da partícula dada por

$$\begin{aligned} p_{in} &= \frac{p_0}{2} [e^{i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{h})} + e^{i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{h})}] \\ &= \frac{p_0}{2} \left[e^{ik[(x+z)\cos \alpha - (x-z)\sin \alpha + h]/\sqrt{2}} + e^{-ik[(x-z)\cos \alpha + (x+z)\sin \alpha + h]/\sqrt{2}} \right]. \end{aligned} \quad (3.46a)$$

Bem como, podemos derivar a velocidade do fluido diretamente ao substituímos a equação acima na Eq. (3.16b),

$$v_{in} = \frac{p_0}{2\rho_0 c_0 k} [\mathbf{k}_1 e^{i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{h})} + \mathbf{k}_2 e^{i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{h})}]. \quad (3.47)$$

Por conseguinte, calculamos o fluxo de momento linear do feixe ao substituímos a Eq. (3.47) na Eq. (3.40a),

$$\mathbf{P}(0) = \frac{E_0}{4} \text{Re}[\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{h}} + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{h}}]. \quad (3.48)$$

Como $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \sqrt{2}k(\cos \alpha \mathbf{e}_x + \sin \alpha \mathbf{e}_z)$, então

$$\mathbf{P}(0) = \frac{E_0}{4} \text{Re}[\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 e^{i\sqrt{2}kh} + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 e^{-i\sqrt{2}kh}]. \quad (3.49)$$

Tal como, a densidade de spin acústico é encontrada substituindo a Eq. (3.47) na Eq.

(3.40b)

$$\begin{aligned}\mathbf{S}(0) &= -\frac{E_0}{4\omega k^2} \text{Im}[(\mathbf{k}_2 \times \mathbf{k}_1)(e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{h}} - e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{h}})] \\ &= \frac{E_0}{2\omega} \sin(\sqrt{2}kh) \mathbf{e}_y = \mathbf{S}_\perp(0).\end{aligned}\quad (3.50a)$$

Onde também utilizamos a relação $\mathbf{k}_2 \times \mathbf{k}_1 = k^2 \mathbf{e}_y$.

Torque de radiação em ondas planas cruzadas

Para obtermos o torque no esferoide de subcomprimento de onda para o feixe de duas ondas planas cruzadas, no sistema de laboratório (sendo que $y = y'$), substituímos as Eqs. (3.49) e (3.50) na Eq. (3.41), assim temos

$$\boldsymbol{\tau}^{rad} = \frac{\pi a^3 E_0}{4} \times \left[\chi \cos(\sqrt{2}kh) \sin 2\alpha + \frac{\epsilon^3}{12} \chi^2 \sin(\sqrt{2}kh) \right] \mathbf{e}_{y'}.\quad (3.51)$$

Note que, conforme a partícula é presa em um nó ($h = \pi/k\sqrt{2}$ ou antinó ($h = 0$)), o torque de radiação se torna

$$\boldsymbol{\tau}_{node}^{rad} = -\boldsymbol{\tau} = -\frac{\pi a^3}{4} E_0 \chi \sin 2\alpha \mathbf{e}_{y'}.\quad (3.52)$$

Observe que esses torques são gerados unicamente pelo termo oriundo do momento linear. Em suma, a partícula ficará alinhada paralelamente ao eixo da onda estacionária em um antinó de pressão ($\alpha = \pi/2$), e com orientação axial ($\alpha = 0$) em um nó de pressão.

Por outro lado, na posição $h = h_\pm = \pm\sqrt{2}\pi 4k$, temos apenas o torque induzido pelo spin,

$$\boldsymbol{\tau}_{spin}^{rad}(h_\pm) = \pm \frac{\epsilon^3}{48} \pi a^3 E_0 \chi^2 \mathbf{e}_{y'}.\quad (3.53)$$

O qual faz a partícula girar em torno do seu eixo menor, sendo no sentido horário em $h = h_+$ (spin up), e no sentido anti-horário em $h = h_-$ (spin down), como ilustrado na Fig. 3.2.

Força de radiação em ondas planas cruzadas

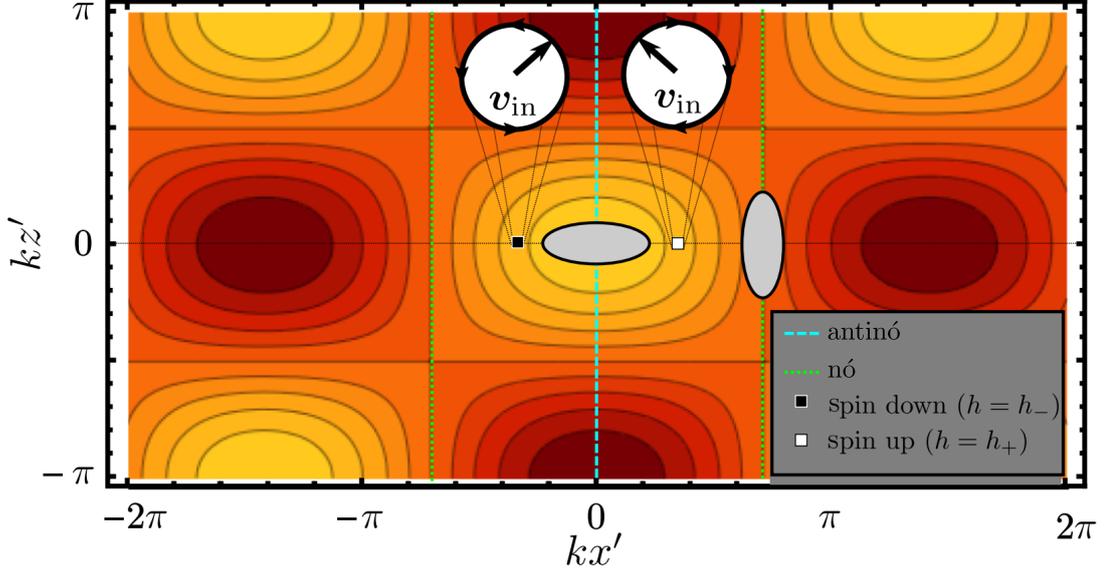
De antemão, salientamos que a força de radiação no referencial do sistema de laboratório, pode ser obtida através da transformação

$$\mathbf{F}^{rad'} = \mathbf{R}_{y'}(-\alpha) \mathbf{F}^{rad},\quad (3.54)$$

onde a matriz $\mathbf{R}_{y'}(-\alpha)$ é definida por meio da Eq. (3.44), e caracteriza uma rotação no sentido anti-horário por um ângulo α em torno do eixo y' .

Isto posto, para determinarmos a força gradiente no esferoide de subcomprimento de

Figura 3.2: Amplitude de pressão (parte real) da onda de entrada, dada pela Eq. (3.43a), com a parte positiva sendo denotada em amarelo claro, e a parte negativa em vermelho escuro. A orientação de equilíbrio da partícula esferoidal (elipse cinza) é ilustrada em um nó ($\alpha = 0$) e em um antinó ($\alpha = \pi/2$). As polarizabilidades da velocidade do fluido estão representadas para $h = h_+ = \sqrt{2}\pi/4k$ (spin up) e $h = h_- = -\sqrt{2}\pi/4k$ (spin down).



Fonte: [Lima et al. 2020].

onda para as duas ondas cruzadas, no referencial da partícula, substituímos as Eqs. (3.46) e (3.47) na Eq. (3.38), então após algumas manipulações algébricas, encontramos

$$\mathbf{F}^{grad} = \frac{\epsilon}{12\sqrt{2}}\pi a^2 E_0 [8f_{00} + 3(f_{11} - f_{10}) \cos 2\alpha] \sin(\sqrt{2}kh) (\cos \alpha \mathbf{e}_x + \sin \alpha \mathbf{e}_z). \quad (3.55)$$

E por outra perspectiva, no referencial do sistema de laboratório, ao substituirmos a Eq. (3.55) na (3.54), temos a componente transversal da força de radiação

$$\mathbf{F}^{grad'} = \epsilon \pi a^2 E_0 \Phi_{ac} \sin(\sqrt{2}kh) \mathbf{e}_{x'}, \quad (3.56a)$$

$$\Phi_{ac} = \frac{1}{12\sqrt{2}} [8f_{00} + 3(f_{11} - f_{10}) \cos 2\alpha]. \quad (3.56b)$$

Onde, o sinal do fator acustoforético Φ_{ac} prevê se a partícula ficará aprisionada em um nó de pressão ($\Phi_{ac} > 0$), ou antinó ($\Phi_{ac} < 0$). Ademais, podemos notar que a força de radiação varia linearmente com a frequência, visto que $\epsilon \sim \omega$.

Ao variarmos ξ_0 em Φ_{ac} , por meio da Eq. (3.32), notamos que o mesmo é sempre positivo, independente se a orientação da partícula está alinhada paralelamente ao eixo axial ($\alpha = 0$) ou ao transversal ($\alpha = \pi/2$). Assim, o fator sendo positivo, a partícula ficará aprisionada transversalmente em um nó de pressão. Além disso, se fizermos a partícula tender a uma esfera $\xi \rightarrow \infty$, temos $\Phi_{ac} \rightarrow \sqrt{2}/3$. Por outro lado, se tendermos a partícula à uma linha fina $\xi \rightarrow 1$, a força transversal tende a zero, pois $\Phi_{ac} \rightarrow \sqrt{2}/3$.

Como a partícula ficará presa no nó de pressão, analisemos a força axial nesse ponto. Em nossa demonstração, essa força é gerada dividido unicamente ao espalhamento. Assim, ao substituirmos as Eq. (3.46) e (3.47) na Eq. (3.36), e especificarmos $h = \pi/\sqrt{2}k$ (nó de pressão), obtemos a força de espalhamento no referencial da partícula

$$F_x^{sca} = \frac{\pi a^2 \epsilon^4 E_0}{24\sqrt{2}} [f_{11}^2 + (f_{11}^2 - 4f_{10}^2) \cos 2\alpha] \sin \alpha, \quad (3.57a)$$

$$F_z^{sca} = \frac{\pi a^2 \epsilon^4 E_0}{24\sqrt{2}} [4f_{10}^2 + (f_{11}^2 - 4f_{10}^2) \cos 2\alpha] \cos \alpha. \quad (3.57b)$$

Novamente por meio da Eq. (3.54), recuperamos a força no referencial do sistema de laboratório

$$\mathbf{F}^{sca'} = \pi a^2 E_0 Q_{rad} \mathbf{e}_{z'} \quad (\text{no nó de pressão}), \quad (3.58a)$$

$$Q_{rad} = \frac{\epsilon^4}{48\sqrt{2}} [4f_{10}^2 + f_{11}^2 + (f_{11}^2 - 4f_{10}^2) \cos 2\alpha]. \quad (3.58b)$$

Onde, nos referimos a quantidade Q_{rad} como a eficiência da força de radiação adimensional. A qual se mantém positiva ao variarmos ξ_0 , mesmo ao mudarmos a orientação da partícula de $\alpha = 0$ para $\alpha = \pi/2$. Portanto, a partícula é empurrada na direção da componente propagante da onda incidente. Ainda, ao fazermos a partícula tender à uma esfera $\xi_0 \rightarrow \infty$, obtemos $Q_{rad}/(ka)^4 \sim 1/6\sqrt{2} \approx 0,118$. Bem como, anulamos a força ao tomarmos o limite da partícula como uma linha fina, $\xi_0 \rightarrow 1$.

3.5 Transferência de spin acústico para uma partícula esferoidal de subcomprimento de onda

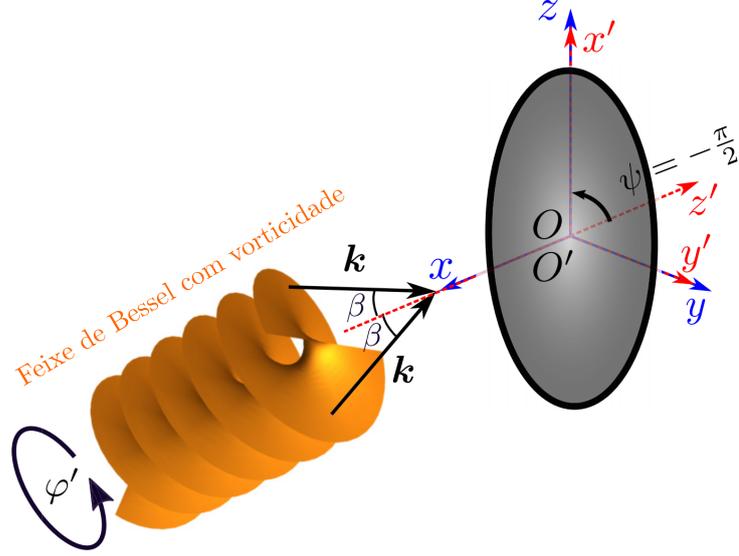
3.5.1 Spin acústico de um feixe de Bessel

Adotamos um feixe incidente com vorticidade do tipo Bessel de primeira ordem ($l = 1$), com frequência angular ω ao se propagar em um fluido de densidade ρ_0 , velocidade do som adiabática c_0 e compressibilidade $\beta_0 = 1/\rho_0 c_0$, o qual, no sistema de coordenadas de laboratório (assinalado por “ ’ ”) é descrito em coordenadas cilíndricas (ϱ', φ', z') pelo potencial de velocidade

$$\phi_{in} = \phi_0 J_l(k\varrho' \sin \beta) e^{ikz' \cos \beta} e^{il\varphi'} \quad (3.59)$$

onde i é a unidade imaginária, $\phi_0 = p_0/k\rho_0 c_0$ (com p_0 sendo o pico de pressão do feixe e $k = \omega/c_0$ o número de onda), J_l é a função de Bessel de ordem l , e β é o ângulo de meio cone do feixe. De modo, que o vetor de onda do feixe é $\mathbf{k} = k(\sin \beta \mathbf{e}_{\varrho'} + \cos \beta \mathbf{e}_{z'})$, com $\mathbf{e}_{\varrho'}$ e $\mathbf{e}_{z'}$ sendo os vetores unitários radial e axial. Omitimos a dependência temporal $e^{-i\omega t}$

Figura 3.3: Interação de uma feixe de Bessel com vorticidade e uma partícula esferoidal. Ambos os sistemas de coordenadas, $O(x, y, z)$ (o sistema da partícula em azul) e $O'(x', y', z')$ (o de laboratório em vermelho), estão centrados no centro geométrico da partícula. O feixe se propaga ao longo de x na direção de $-\infty$ e ao longo de z' na direção de $+\infty$. Através de uma rotação de 90° no sentido anti-horário em torno de y e y' podemos mapear os sistemas de coordenadas, um em relação ao outro.



Fonte: [Lopes et al. 2020].

por simplicidade, a pressão e velocidade incidentes são dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{in} &= \nabla \phi_{in}, \\ p_{in} &= ik\rho_0 c_0 \phi_{in}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

A densidade de spin acústico de um feixe incidente é determinado por [Bliokh e Nori 2019]

$$\mathbf{S} = \frac{\rho_0}{2\omega} \text{Im}[\mathbf{v}_{in}^* \times \mathbf{v}_{in}], \quad (3.61)$$

onde Im representa a parte imaginária da quantidade especificada e o asterístico "*" o complexo conjugado. Com isso, substituindo Eq. (3.59) na Eq. (3.61) por meio da Eq. (3.60), obtemos

$$S_{z'}(\varrho') = \frac{2E_0 \sin \beta}{\omega k r} J_l(k\varrho' \sin \beta) \dot{J}_l(k\varrho' \sin \beta) \quad (3.62)$$

onde $E_0 = \beta_0 p_0^2 / 2$ é a densidade de energia característica do feixe e o ponto "'" representa a derivada com relação ao argumento da função. Sendo, que neste caso temos o spin diferente de zero apenas quando $|l| = 1$, por simplicidade consideramos $l = 1$, assim o spin axial é dado por

$$\mathbf{S}_{z'}(0) = \frac{E_0 \sin^2 \beta}{2\omega} \mathbf{e}_{z'} \quad (3.63)$$

Aqui fica evidente, que podemos mensurar a densidade de energia E_0 através do spin acústico do feixe de Bessel.

3.5.2 Torque de radiação acústico devido ao spin de um feixe de Bessel

Como é nítido na equação Eq. (3.39), para calcularmos o torque de radiação acústica em um esferoide por este método, precisamos conhecer de antemão o coeficiente de forma do feixe incidente, o qual representa diretamente o tipo de feixe que estamos utilizando. Como queremos calcular o torque devido a incidência de um feixe de Bessel, nosso coeficiente de forma do feixe no sistema de laboratório é dado por [Mitri e Silva 2011]:

$$a'_{nl} = 4\pi i^{n-m} Y_n^m(\beta, 0) H(n-m) \delta_{ml} \quad (3.64)$$

onde $H(n-m)$ é a função degrau unitária, que é igual a 0 para $n-m < 0$ e 1 para $n-m \geq 0$. No entanto, segundo a Eq.(3.39) temos que calcular o coeficiente de forma do feixe no sistema de coordenadas da partícula ($a_{1,m}$). Assim, a correspondência entre o coeficiente de forma do feixe no sistema de laboratório e no sistema da partícula, é dada através da função D de Wigner, como [Mishchenko, Travis e Lacic 2002]:

$$a_{nm} = \sum_{\mu=-n}^n a'_{n\mu} D_{m\mu}^n(\alpha, \psi, \zeta), \quad (3.65)$$

com α, ψ , e ζ sendo os ângulos de Euler. Logo, mapeando o sistema da partícula pelo de laboratório, obtemos os ângulos de Euler como $\alpha = 0, \psi = -\pi/2$ e $\zeta = 0$. Como queremos $a_{1,m}$, precisamos apenas de $a'_{1,\mu}$. Portanto, através da Eq. (3.64) e da relação (3.65), obtemos os coeficientes de forma do feixe dipolares no sistema da partícula:

$$a_{1,-1} = a_{11} = -\sqrt{\frac{3\pi}{2}} \sin \beta, \quad a_{10} = \sqrt{3\pi} \sin \beta. \quad (3.66)$$

Dessa forma, utilizando esses coeficientes na Eq. (3.39), chegamos no torque de radiação ao longo do eixo x , como

$$\tau_{rad,x} = \frac{3\pi}{k^3} E_0 \sin^2 \beta \operatorname{Re}[s_{10} + s_{11} + 2s_{10}s_{11}^*]. \quad (3.67)$$

Então, utilizando os coeficientes de espalhamento (Eq. 3.31) na expressão acima, temos

$$\boldsymbol{\tau}_{rad} = -(ka)^3 \chi \pi a^3 E_0 \sin^2 \beta \mathbf{e}_x, \quad ka \ll 1, \quad (3.68a)$$

$$\chi = \frac{(f_{11} - 2f_{10})^2}{48\xi_0^6}, \quad (3.68b)$$

onde, como podemos perceber, χ está relacionado com a diferença entre os fatores de dipolo.

Fazendo uma análise assintótica das expressões giroacústicas, apontadas como parâmetro geométricos da partícula, que representam uma partícula esférica ($\xi_0 \gg 1$) e uma partícula esbelta ($\xi_0 \approx 1$), obtemos, respectivamente

$$\chi = \frac{3}{400} \left(\frac{1}{\xi_0^4} - \frac{47}{35\xi_0^6} \right), \quad (3.69a)$$

$$\chi = \frac{4}{27}(\xi_0 - 1)^2 + \frac{4}{9}(\xi_0 - 1)^3 \left[3 + \ln \frac{(\xi_0 - 1)^2}{4} \right] \quad (3.69b)$$

É de se esperar que o torque de radiação desapareça quando a partícula se aproxima de uma esfera, $\lim_{\xi_0 \rightarrow \infty} \tau_{rad} = 0$, visto que, nenhum torque é verificado em uma partícula esférica não absorvedora (rígida) [Silva, Lobo e Mitri 2012]. No entanto, como podemos notar em (3.69) ambas as expressões para o fator giroacústico se aproximam de zero. Logo, isso indica que o fator geométrico do torque χ deve ter um valor de máximo no intervalo $1 \leq \xi < \infty$. Assim, utilizando o método numérico de Nelder-Mead através da função NMaximize do software Mathematica [Wolfram Research, Inc. 2022], foi encontrado o valor máximo de $\chi_{max} = 0.14$ para $\xi_0 = 1.31$.

Enfim, podemos estabelecer a conexão do torque de radiação acústica e o spin acústico. Para tal, voltamos o torque de radiação para o sistema de laboratório, onde o torque é positivo para $e_{z'} = -e_x$, ou seja, os eixos z' e x tem orientações opostas, além de utilizamos a Eq. (3.63), com isso, o torque de radiação acústica na partícula induzido pelo spin é

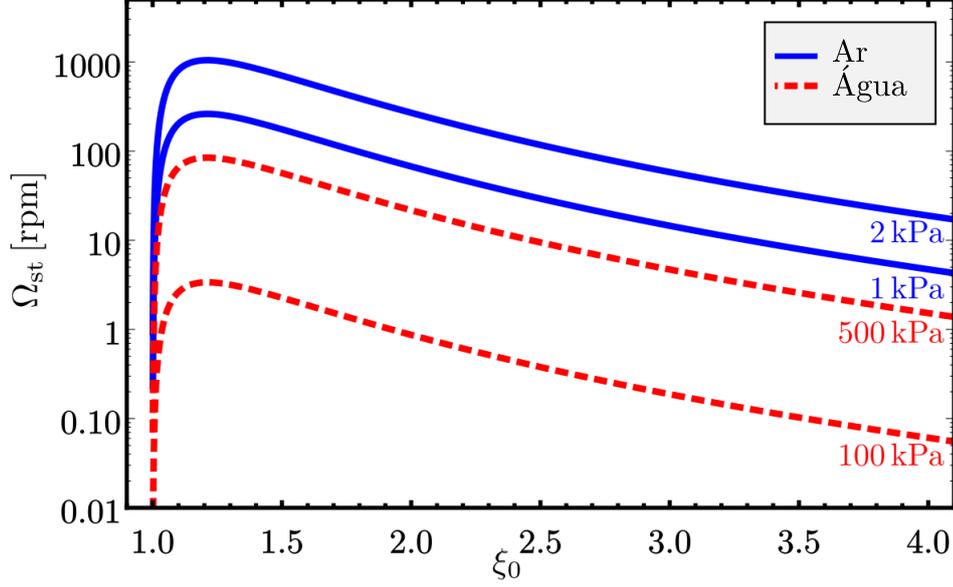
$$\tau_{rad} = \frac{\chi \pi a^3 \omega}{2} S_{z'}(0). \quad (3.70)$$

A velocidade angular em função do parâmetro geométrico ξ_0 , é apresentada na Fig. 3.4, para diferentes pressões de pico, $p_0 = 1$ e 2 kPa no ar, e $p_0 = 100$ e 500 kPa na água. Nesse caso a velocidade máxima foi obtida para $\xi_0 = 1.21$, sendo equivalente a uma razão de aspecto de $a/b = 1.77$. O que difere da razão de aspecto para o torque máximo, essa diferença corresponde à ação do torque de arrasto viscoso que atua sobre a partícula, o qual foi explicitado na Eq. (3.73a). Note, que enquanto a partícula na água atinge uma velocidade angular de 100 rpm, no ar esse valor pode ser 10 vezes maior.

3.5.3 Relação entre o spin acústico e a velocidade angular da partícula

Ao incidirmos um feixe de Bessel de primeira ordem lateralmente em uma partícula esférica podemos provocar uma rotação da mesma em torno de seu eixo de menor dimensão. Para avaliarmos esse fenômeno, consideraremos uma partícula imersa em um

Figura 3.4: Velocidade angular estacionária, dada pela Eq. (3.73a), versus o parâmetro geométrico da partícula ξ_0 , para diferentes picos de pressão, com $\beta = \pi/4$. Para a partícula imersa em água, temos $a = 120 \mu\text{m}$ e $f = 1 \text{ MHz}$; e no ar, $a = 680 \mu\text{m}$ e $f = 40 \text{ kHz}$. Obtemos o valor máximo da velocidade angular para $\xi_0 = 1.21(a/b = 1.77)$.



Fonte: [Lopes et al. 2020].

fluido viscoso incompressível com viscosidade dinâmica μ_0 . Além disso, por simplicidade, vamos assumir que o escoamento provocado em virtude do spin da partícula tem um número de Reynolds baixo, $Re \ll 1$, o que nos enquadra no denominado fluxo de Stokes. Ressaltamos aqui, que o problema de espalhamento acústico foi resolvido, sem perda de coesão, considerando um fluido compressível.

Por conseguinte, tomando o sistema de coordenadas de laboratório, a dinâmica de rotação da partícula pode ser descrita pela segunda lei de Newton, tal como

$$I_p \dot{\Omega} = \tau_{rad} - \tau_{drag}(\Omega), \quad (3.71)$$

onde I_p é o momento de inércia da partícula esferoidal, relativo à rotação em torno do seu eixo menor, Ω é a velocidade angular da partícula, e τ_{drag} é o torque de arrasto, que se contrapõe ao torque de radiação acústica.

Dessa forma, adotando a condição de contorno de não deslocamento na superfície da partícula $\xi = \xi_0$, é possível obter o torque de arrasto como [Kong et al. 2014]

$$\tau_{drag} = \pi \mu_0 d^3 \tilde{\tau}_{drag} \Omega, \quad (3.72a)$$

$$\tilde{\tau}_{drag} = \frac{4}{3} \frac{1 - 2\xi_0^2}{2\xi_0 - (1 + \xi_0^2) \ln\left(\frac{\xi_0+1}{\xi_0-1}\right)}. \quad (3.72b)$$

De modo que, o torque de arrasto adimensional $\tilde{\tau}_{drag}$ depende somente da geometria da

partícula, de tal forma que conforme a partícula se aproxima assintoticamente ($\xi_0 \gg 1$) de uma esfera de raio r_0 , resgatamos o resultado clássico do torque de arrasto para uma geometria esférica $\tau_{drag}^{esfera} = 8\pi\mu_0 r_0^3 \Omega$, com $r_0 \approx \xi_0 d/2$.

Semelhantemente ao que ocorre em uma queda livre (levando em conta a resistência do ar), ao passo que a velocidade angular aumenta o torque de arrasto também aumenta até atingir um certo valor que se equilibra com o torque de radiação, com isso, a partícula atinge uma velocidade estacionária (tal qual a velocidade terminal da queda livre), que pode ser encontrada a partir da combinação das Eqs. (3.68), (3.71) e (3.72),

$$\Omega_{st} = \frac{\tau_{rad}}{\pi\mu_0 d^3 \tilde{\tau}_{drag}} = (ka)^3 \tilde{\Omega}_{st} \frac{E_0}{\mu_0} \sin^2 \beta \mathbf{e}_{z'}, \quad (3.73a)$$

$$\tilde{\Omega}_{st} = \frac{\chi \xi_0^3}{8\tilde{\tau}_{drag}}, \quad (3.73b)$$

onde $\tilde{\omega}_{st}$ é a velocidade angular estacionária adimensional. Dessarte, se conseguirmos mensurar a velocidade angular Ω_{st} , a medida que já dispomos dos parâmetros do feixe e da partícula, é possível estipular a viscosidade do fluido μ_0 , por meio da Eq. (3.73a).

Por conseguinte, para uma partícula quase esférica ($\xi_0 \gg 1$) e outra esbelta ($\xi_0 \approx 1$), temos a velocidade angular adimensional dada por

$$\tilde{\Omega}_{st} = \frac{3}{3200} \left(\frac{1}{\xi_0^4} - \frac{31}{70\xi_0^6} \right), \quad \xi_0 \gg 1, \quad (3.74a)$$

$$\tilde{\Omega}_{st} = -\frac{1}{36} (\xi_0 - 1)^2 \left[1 + \ln \left(\frac{\xi_0 - 1}{2} \right) \right], \quad \xi_0 \approx 1. \quad (3.74b)$$

E finalmente, podemos obter a relação entre o spin acústico axial e a velocidade angular da partícula através das Eqs. (3.70) e (3.73a),

$$\mathbf{S}_{z'}(0) = \gamma \Omega_{st}, \quad (3.75a)$$

$$\gamma = \frac{16\mu_0 \tilde{\tau}_{drag}}{(ka)^3 \chi \xi_0^3 \omega}, \quad (3.75b)$$

3.6 Campos acústicos médios devido uma partícula axis-simétrica de subcomprimento de onda

Tomemos uma partícula axissimétrica qualquer, isto é, com simetria rotacional em torno de um eixo, com dimensões de subcomprimento de onda, imersa em um fluido com densidade ρ_0 e compressibilidade $\beta_0 = 1/\rho_0 c_0^2$, com c_0 sendo a velocidade do som adiabática. Tal partícula, espalha uma onda incidente com amplitude de pressão p_{in} , frequência angular ω e número de onda k .

Utilizaremos inicialmente, e convenientemente, um sistema de coordenadas destro (seguindo a regra da mão direita, com o polegar direito apontando ao longo do sentido positivo do eixo z_p e a curva dos demais dedos representando um movimento do eixo x_p para o eixo y_p), fixado no centro geométrico da partícula (centroide), simbolizado por $O_{x_p y_p z_p}$. Nada obstante, também apresentaremos os campos acústicos médios no referencial de um sistema de laboratório, com centro fixo no centroide da partícula, referenciado por O_{xyz} . De modo que, representaremos os vetores unitários cartesianos dos sistemas supracitados por \mathbf{e}_i e \mathbf{e}_{i_p} , com $i = x, y, z$ e $i_p = x_p, y_p, z_p$. Com isso, se tivermos uma quantidade vetorial expressa no referencial da partícula $O_{x_p y_p z_p}$ e desejarmos convertê-la para o referencial do laboratório O_{xyz} , precisamos apenas de dois ângulos (α, β) , tidos como ângulos de Euler, visto que a partícula é invariante para rotações em torno do eixo z_p . Deste modo, o processo de conversão consiste em duas rotações convencionais: sendo a primeira uma rotação anti-horária em um ângulo α em torno do eixo z (regra da mão direita, com o polegar no sentido positivo de z), e a segunda, uma rotação anti-horária com ângulo β em torno do eixo y (regra da mão direita, com polegar no sentido positivo de y). Sendo assim, adotamos o seguinte tensor de rotação

$$\begin{aligned} \mathbf{R} = & \cos \alpha \cos \beta \mathbf{e}_x \mathbf{e}_{x_p} - \sin \alpha \mathbf{e}_x \mathbf{e}_{y_p} + \cos \alpha \sin \beta \mathbf{e}_x \mathbf{e}_{z_p} + \\ & + \sin \alpha \cos \beta \mathbf{e}_y \mathbf{e}_{x_p} + \cos \alpha \mathbf{e}_y \mathbf{e}_{y_p} + \sin \alpha \sin \beta \mathbf{e}_y \mathbf{e}_{z_p} - \\ & - \sin \beta \mathbf{e}_z \mathbf{e}_{x_p} + \cos \beta \mathbf{e}_z \mathbf{e}_{z_p}, \end{aligned} \quad (3.76)$$

onde o produto $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_{i_p}$ é uma díade, que forma a base padrão dos tensores de segunda ordem no espaço euclidiano. Ao passo que, os ângulos de Euler são dados no intervalo $0 \leq \alpha < 2\pi$ e $0 \leq \beta \leq \pi$. De forma análoga, o tensor rotacional inverso, que transforma um vetor do referencial de laboratório O_{xyz} para o referencial da partícula $O_{x_p y_p z_p}$, é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{-1} = & \cos \alpha \cos \beta \mathbf{e}_{x_p} \mathbf{e}_x + \sin \alpha \cos \beta \mathbf{e}_{y_p} \mathbf{e}_x - \sin \beta \mathbf{e}_{z_p} \mathbf{e}_x - \\ & - \sin \alpha \mathbf{e}_{x_p} \mathbf{e}_y + \cos \alpha \mathbf{e}_{y_p} \mathbf{e}_y + \sin \alpha \cos \beta \mathbf{e}_{z_p} \mathbf{e}_y - \\ & - \cos \alpha \sin \beta \mathbf{e}_{x_p} \mathbf{e}_z + \cos \beta \mathbf{e}_{z_p} \mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (3.77)$$

Nesse formato, estabelecemos a orientação da partícula no referencial da partícula e no referencial de laboratório, nessa ordem, como

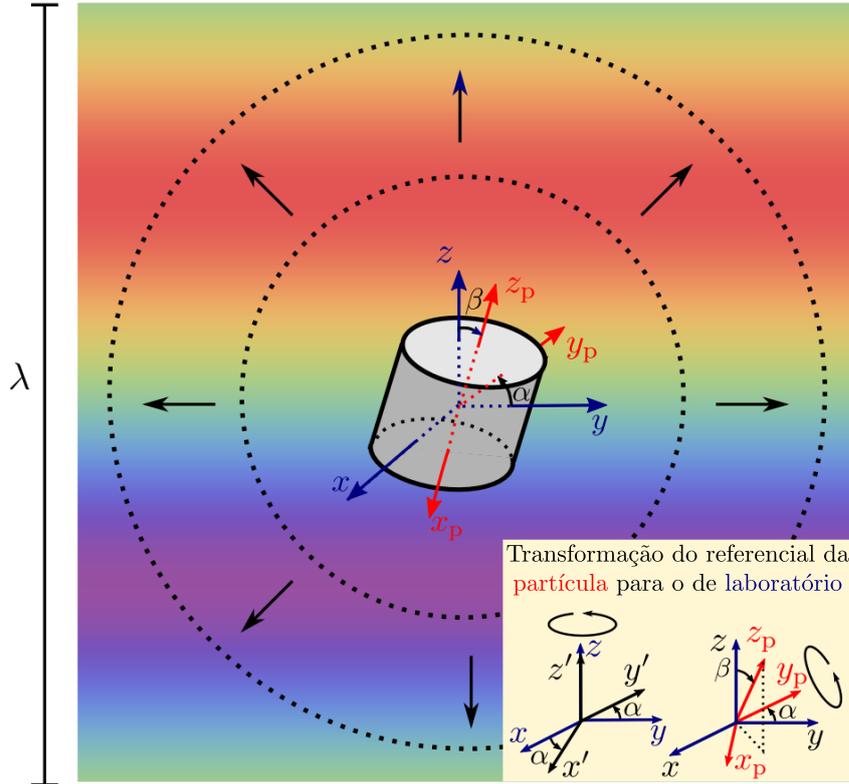
$$\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_{z_p}, \quad (3.78a)$$

$$\mathbf{e}_l = \mathbf{R} \cdot \mathbf{e}_{z_p} = \cos \alpha \sin \beta \mathbf{e}_x + \sin \alpha \sin \beta \mathbf{e}_y + \cos \beta \mathbf{e}_z, \quad (3.78b)$$

onde o ponto central “ \cdot ” representa o produto escalar entre o tensor e um, ou dois vetores. Perceba, que para obtermos a Eq. (3.78b), utilizamos as relações $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_{x_p} \cdot \mathbf{e}_{z_p} = \mathbf{e}_i \mathbf{e}_{y_p} \cdot \mathbf{e}_{z_p} = \mathbf{0}$ e $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_{z_p} \cdot \mathbf{e}_{z_p} = \mathbf{e}_i$.

Iremos considerar a aproximação de comprimentos de onda longos, isto significa que,

Figura 3.5: Ilustração do problema: Interação de uma onda plana (imagem de fundo com uma crista positiva e um vale negativo em roxo e vermelho, nessa ordem) de comprimento de onda λ com uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda (representada por um cilindro cinza). A orientação da partícula em relação ao referencial de laboratório (eixos em azul) é descrita por dois ângulos de Euler (α, β) . O referencial da partícula é representado pelos eixos em vermelho. As setas e os círculos concêntricos denotam o espalhamento da onda pela partícula. Na inserção do canto inferior direito, apresentamos as rotações elementares que mapeiam um vetor do referencial da partícula (eixos em azul) para o de laboratório (eixos em vermelho).



Fonte: [Lima e Silva 2021].

ao nomearmos a maior dimensão da nossa partícula por a , está sempre será muito menor que o comprimento de onda adotado, $a \ll \lambda$. Para tal, é conveniente definirmos a para uma partícula axissimétrica, assim, em coordenadas esféricas, a partícula ocupa uma região delimitada por $\Omega_p = \{(r_p, \theta_p, \phi_p) | 0 \leq r_p \leq R_p(\theta_p), 0 \leq \theta_p \leq \pi, 0 \leq \phi_p < 2\pi\}$, sendo R_p a distância radial à superfície da partícula. Desse maneira, a maior e menor distância radial à superfície da partícula são, respectivamente,

$$a = \max_{0 \leq \theta_p \leq \pi} R_p(\theta_p), \quad (3.79a)$$

$$b = \min_{0 \leq \theta_p \leq \pi} R_p(\theta_p). \quad (3.79b)$$

Onde para uma partícula esférica teríamos $a = b$. Conseqüentemente, podemos definir o

parâmetro característico da partícula de subcomprimento de onda como

$$ka = \frac{2\pi a}{\lambda} \ll 1. \quad (3.80)$$

3.6.1 Coeficientes de espalhamento de uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda

Recapitulando, para determinarmos a pressão espalhada, resolvemos a equação de Helmholtz definindo uma condição de contorno na superfície da partícula e a condição de radiação de Sommerfeld no campo distante. De modo que, a solução é uma série que estima a pressão espalhada através de uma soma infinita de ondas parciais, as quais podemos definir, convenientemente em coordenadas esféricas (r_p, θ_p, ϕ_p) , por $h_n(kr_p)Y_n^m(\theta_p, \phi_p)$, com h_n sendo a função esférica de Hankel de ordem n e de primeiro tipo, Y_n^m o harmônico esférico, e m representa o momento angular orbital da onda (Sec. 3.3). Além disso, ao lidarmos com partículas muito menores que o comprimento de onda, podemos truncar a expansão parcial no termo de momento de dipolo ($n = 1$). Assim, a aproximação dipolar para a expansão em ondas parciais da pressão espalhada é dada por

$$p_{sc} = p_0 \{ a_{00} s_{00} Y_0^0(\theta_p, \phi_p) h_0(kr_p) + [a_{1,-1} s_{1,-1} Y_1^{-1}(\theta_p, \phi_p) + a_{10} s_{10} Y_1^0(\theta_p, \phi_p) + a_{11} s_{11} Y_1^1(\theta_p, \phi_p)] h_1(kr_p) \}, \quad (3.81)$$

onde p_0 é a amplitude de pressão, a_{nm} é o coeficiente de forma do feixe da onda incidente, e os coeficientes de espalhamento s_{nm} representam os modos de monopolo (s_{00}), dipolo axial (s_{10}), e dipolo transversal ($s_{1,1}$ e $s_{1,-1}$). Por simplicidade, omitimos o termo de dependência temporal $e^{-i\omega t}$.

Assim, a função que exprime a distribuição angular dos modos (n, m) em uma superfície esférica com raio $R > a$ centrada no centroide da partícula

$$p_{nm}(\theta_p, \phi_p) = \frac{p_{sc}(kR, \theta_p, \phi_p)}{p_0 a_{nm} h_n(kR)}. \quad (3.82)$$

Enfim, utilizando a ortogonalidade dos harmônicos esféricos, temos os coeficientes de espalhamento como a projeção da pressão espalhada normalizada sobre o modo angular correspondente,

$$\begin{aligned} s_{nm} &= \langle n, m | p_{nm} \rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi_p \int_0^\pi d\theta_p \sin \theta_p p_{nm}(\theta_p, \phi_p) Y_n^{m*}(\theta_p, \phi_p), \end{aligned} \quad (3.83)$$

onde o asterisco “ $*$ ” representa a conjugação complexa, e utilizamos a notação de bracket de Dirac $\langle | \rangle$ para simplificar. Devido a axissimetria da partícula, os modos de dipolo transversais são degenerados, $s_{1,-1} = s_{11}$. Com isso, os coeficientes de espalhamento do

nosso problema são

$$s_{00} = \langle 0, 0 | p_{00} \rangle, s_{10} = \langle 1, 0 | p_{10} \rangle, s_{11} = \langle 1, 1 | p_{11} \rangle. \quad (3.84)$$

Os coeficientes acima são únicos para cada partícula e independem do feixe incidente, dessa forma, uma vez calculados (veremos como computá-los numericamente no capítulo a seguir) para um feixe incidente simples, como uma onda plana, podem ser utilizados para qualquer configuração acústica, seja analítica, ou formada por ondas estruturadas geradas em dispositivos acustofluidicos.

3.6.2 Força de radiação acústica para uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda

Podemos expressar a força de radiação acústica em uma partícula com simetria axial em termos dos coeficientes de espalhamento e do campo incidente [Lima et al. 2020], como:

$$\mathbf{F}_p^{rad} = \text{Re}[\langle (\mathbf{e}_{x_p} \mathbf{e}_{x_p} + \mathbf{e}_{y_p} \mathbf{e}_{y_p} \mathcal{D}_{x_p y_p} + \mathbf{e}_{z_p} \mathbf{e}_{z_p} \mathcal{D}_{z_p z_p}) \cdot \mathbf{v}_{in,p}^* \rangle]_{\mathbf{r}_p = \mathbf{0}}, \quad (3.85a)$$

$$\mathcal{D}_{x_p, y_p} = -\frac{2\pi i}{k^2} \left[\frac{3\rho_0}{k} (s_{11} \mathbf{v}_{in,p} \cdot \nabla_{x_p, y_p} + s_{10} v_{in, z_p} \partial_{z_p}) - i s_{00} (1 + 2s_{11}^*) \frac{p_{in}}{c_0} \right], \quad (3.85b)$$

$$\mathcal{D}_{z_p, z_p} = -\frac{2\pi i}{k^2} \left[\frac{3\rho_0}{k} (s_{11} \mathbf{v}_{in,p} \cdot \nabla_{x_p, y_p} + s_{10} v_{in, z_p} \partial_{z_p}) - i s_{00} (1 + 2s_{10}^*) \frac{p_{in}}{c_0} \right], \quad (3.85c)$$

sendo que, $\mathbf{v}_{in,p} = (v_{in, x_p}, v_{in, y_p}, v_{in, z_p})$ é a velocidade do fluido no referencial da partícula $O_{x_p y_p z_p}$, $\nabla_{x_p y_p} = \mathbf{e}_{x_p} \partial_{x_p} + \mathbf{e}_{y_p} \partial_{y_p}$, e os campos acústicos são avaliados em $\mathbf{r} = \mathbf{0}$. Sabendo que os campos acústicos de entrada da Eq. (3.85) tiveram seus efeitos termoviscosos desprezados, podemos então utilizar a relação de pressão-velocidade

$$\mathbf{v} = -\frac{i \nabla p}{\rho_0 c_0 k}, \quad (3.86)$$

para reescrevermos a força de radiação como

$$\mathbf{F}_p^{rad} = \frac{1}{2} \text{Re}[\beta_0 \boldsymbol{\alpha}_p^{(m)*} \cdot p_{in}^* \nabla_p p_{in} + \rho_0 \boldsymbol{\alpha}_p^{(d)*} \cdot \mathbf{v}_{in,p}^* \cdot \nabla_p \mathbf{v}_{in,p}]_{\mathbf{r}_p = \mathbf{0}}, \quad (3.87)$$

com $\nabla_p = \mathbf{e}_{x_p} \partial_{x_p} + \mathbf{e}_{y_p} \partial_{y_p} + \mathbf{e}_{z_p} \partial_{z_p}$, e

$$\boldsymbol{\alpha}_p^{(m)} = -\frac{4\pi i}{k^3} s_{00} [\mathbf{I} + 2s_{11}^* (\mathbf{e}_{x_p} \mathbf{e}_{x_p} + \mathbf{e}_{y_p} \mathbf{e}_{y_p}) + 2s_{10}^* \mathbf{e}_{z_p} \mathbf{e}_{z_p}], \quad (3.88a)$$

$$\boldsymbol{\alpha}_p^{(d)} = -\frac{12\pi i}{k^3} [s_{11} (\mathbf{e}_{x_p} \mathbf{e}_{x_p} + \mathbf{e}_{y_p} \mathbf{e}_{y_p}) + s_{10} \mathbf{e}_{z_p} \mathbf{e}_{z_p}], \quad (3.88b)$$

sendo estes os tensores de polarizabilidade acústica de monopolo e dipolo (em unidades de volume) da partícula, onde $\mathbf{I} = \mathbf{e}_{x_p} \mathbf{e}_{x_p} + \mathbf{e}_{y_p} \mathbf{e}_{y_p} + \mathbf{e}_{z_p} \mathbf{e}_{z_p}$ é o tensor unitário. Com isso,

obtida a força no referencial da partícula $O_{x_p y_p z_p}$, podemos convertê-la para o referencial de laboratório O_{xyz} por meio do tensor de rotação da Eq. (3.76), assim temos

$$\mathbf{F}^{rad} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{F}_p^{rad}, \quad (3.89)$$

dessa forma, utilizando $\nabla_p = \mathbf{R}^{-1} \cdot \nabla|_{r=r_p}$, por meio do tensor de rotação inversa da Eq. (3.77), obtemos

$$\mathbf{F}^{rad} = \frac{1}{2} \text{Re}[\beta_0 \boldsymbol{\alpha}^{(m)*} \cdot p_{in}^* \nabla p_{in} + \rho_0 \boldsymbol{\alpha}^{(d)*} \cdot \mathbf{v}_{in}^* \cdot \nabla \mathbf{v}_{in}]_{r=0}, \quad (3.90a)$$

$$\boldsymbol{\alpha}^{(m)} = \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\alpha}_p^{(m)} \cdot \mathbf{R}^{-1}, \quad (3.90b)$$

$$\boldsymbol{\alpha}^{(d)} = \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\alpha}_p^{(d)} \cdot \mathbf{R}^{-1}, \quad (3.90c)$$

com \mathbf{v}_{in} sendo a velocidade do fluido no referencial do laboratório O_{xyz} . Assim temos a expressão para a força de radiação em um partícula imersa em um fluido Newtoniano no referencial de laboratório. Sendo esta uma generalização da forma canônica da força de radiação derivada para partículas esféricas [Doinikov 1994], [Toftul et al. 2019]. Além disso, os efeitos termoviscosos negligenciados podem ser analisados ao considerar os campos de temperatura na solução do problema de espalhamento, com as condições de contorno adequadas [Karlsen e Bruus 2015].

Para uma melhor compreensão das expressões acima, é válido analisarmos o comportamento da força de radiação obtida em ondas estacionárias e propagantes. Para tal, visto que a amplitude de pressão para uma onda estacionária é uma função de valor real, isto implica em $p_{in}^* \nabla p_{in} = (1/2) \nabla |p_{in}|^2$, e conseqüentemente pela Eq. (3.86) em $\mathbf{v}_{in}^* \cdot \nabla \mathbf{v}_{in} = (1/2) \nabla |\mathbf{v}_{in}|^2$. Portanto, a força da Eq. (3.90), para uma onda estacionária torna-se uma força gradiente

$$\mathbf{F}^{rad} = [\text{Re}[\boldsymbol{\alpha}^{(m)}] \cdot \nabla E_{pot} + \text{Re}[\boldsymbol{\alpha}^{(d)}] \cdot \nabla E_{kin}]_{r=0}. \quad (3.91)$$

Onde vemos que as densidades de energias cinética $E_{kin} = \rho_0 |\mathbf{v}_{in}|^2 / 4$ e potencial $E_{pot} = \beta_0 |p_{in}|^2 / 4$ transportadas pelo fluido são transformadas em força de radiação acústica, mediante sua projeção gradiente na parte real das polarizabilidades da partícula.

Logo, tomando os campos acústicos de pressão e velocidade do fluido, para uma onda estacionária dados por

$$p_{in} = p_0 \cos[k(z + z_0)], \quad (3.92a)$$

$$\mathbf{v}_{in} = \frac{i p_0}{\rho_0 c_0} \sin[k(z + z_0)] \mathbf{e}_z, \quad (3.92b)$$

onde z_0 é a posição da partícula em relação ao antinó de pressão em $z = 0$. Então,

aplicando os campos da Eq. (3.92) na Eq. (3.91), chegamos na força como

$$\mathbf{F}^{rad} = F_0 \Phi \sin 2kz_0, \quad (3.93a)$$

$$F_0 = AE_0, \quad E_0 = \frac{1}{4}\beta_0 p_0^2, \quad (3.93b)$$

sendo E_0 a densidade de energia acústica, F_0 a força característica, a área característica A pode ser a área de seção transversal da partícula, axial (A_{\parallel}) ou transversal (A_{\perp}), e o vetor acustoforético é dado por

$$\Phi = \frac{k}{A} \text{Re}[\boldsymbol{\alpha}^{(m)} - \boldsymbol{\alpha}^{(d)}] \cdot \mathbf{e}_z \quad (3.94a)$$

$$= \frac{2\pi}{k^2 A} \cos \alpha \sin 2\beta \text{Re}[3i(s_{10} - s_{11}) - 2is_{00}(s_{10}^* - s_{11}^*)] \mathbf{e}_x + \quad (3.94b)$$

$$+ \frac{2\pi}{k^2 A} \sin \alpha \sin 2\beta \text{Re}[3i(s_{10} - s_{11}) - 2is_{00}(s_{10}^* - s_{11}^*)] \mathbf{e}_y + \quad (3.94c)$$

$$+ \frac{4\pi}{k^2 A} \text{Re}[3i(s_{10} \cos^2 \beta - s_{11} \sin^2 \beta) - \quad (3.94d)$$

$$- is_{00}(1 + 2s_{10}^* \cos^2 \beta - 2s_{11}^* \sin^2 \beta)] \mathbf{e}_z. \quad (3.94e)$$

Podemos notar que a força de radiação depende dos ângulos α e β , posteriormente constatamos que as configurações de equilíbrio ocorrem quando a partícula está alinhada axialmente ($\beta = 0$) e transversalmente ($\beta = \pi/2$), mas independente da orientação da partícula a força de radiação será axial,

$$\mathbf{F}^{rad} = F_0 \Phi \sin 2kz_0 \mathbf{e}_z, \quad (3.95)$$

onde fator acustoforético Φ , assumirá um valor axial Φ_{\parallel} ou transversal Φ_{\perp} , dados respectivamente por

$$\Phi_{\parallel} = \frac{4\pi}{k^2 A_{\parallel}} \text{Re}[3is_{10} - is_{00}(1 + 2s_{10}^*)], \quad (\beta = 0), \quad (3.96a)$$

$$\Phi_{\perp} = \frac{4\pi}{k^2 A_{\perp}} \text{Re}[3is_{11} - is_{00}(1 + 2s_{11}^*)], \quad (\beta = \pi/2). \quad (3.96b)$$

O sinal de Φ prevê a posição de aprisionamento da partícula, para $\Phi > 0$ a partícula é armadilhada no nó de pressão, e para $\Phi < 0$ em um antinó de pressão. Note que, para partículas esféricas, em virtude de sua simetria, os coeficientes de dipolo axial e transversais são degenerados $s_{10} = s_{11}$, logo os fatores acustoforéticos axial e transversal também se equivalem $\Phi_{\parallel} = \Phi_{\perp}$.

Partindo agora para a análise da força em uma onda plana propagante, temos os

seguintes campos de pressão e velocidade do fluido

$$p_{in} = p_0 e^{ikz}, \quad (3.97a)$$

$$\mathbf{v}_{in} = \frac{p_0}{\rho_0 c_0} e^{ikz} \mathbf{e}_z. \quad (3.97b)$$

Substituindo esses campos na Eq. (3.90), a força se torna

$$\mathbf{F}^{rad} = F_0 \Phi, \quad (3.98a)$$

$$\Phi = -\frac{2k}{A} \text{Im}[\boldsymbol{\alpha}^{(m)} + \boldsymbol{\alpha}^{(d)}] \cdot \mathbf{e}_z \quad (3.98b)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2 A} \cos \alpha \sin 2\beta \text{Re}[3(s_{10} - s_{11}) - 2s_{00}(s_{10}^* - s_{11}^*)] \mathbf{e}_x + \quad (3.98c)$$

$$+ \frac{4\pi}{k^2 A} \sin \alpha \sin 2\beta \text{Re}[3(s_{10} - s_{11}) - 2s_{00}(s_{10}^* - s_{11}^*)] \mathbf{e}_y + \quad (3.98d)$$

$$+ 8\pi \text{Re}[3(s_{10} \cos^2 \beta - s_{11} \sin^2 \beta) + \quad (3.98e)$$

$$+ s_{00}(1 + 2s_{10}^* \cos^2 \beta - 2s_{11}^* \sin^2 \beta)] \mathbf{e}_z. \quad (3.98f)$$

Temos mais uma vez, a força tendo uma dependência com a orientação da partícula, então analisando novamente a força nas configurações de equilíbrio axial ($\beta = 0$) e transversal ($\beta = \pi/2$) da partícula, obtemos

$$\mathbf{F}^{rad} = F_0 \Phi \mathbf{e}_z, \quad (3.99)$$

onde outra vez o fator acustoforético Φ , assumirá um valor axial Φ_{\parallel} ou transversal Φ_{\perp} , desta vez expressos por

$$\Phi_{\parallel} = 8\pi \text{Re}[3s_{10} - s_{00}(1 + 2s_{10}^*)], \quad (\beta = 0), \quad (3.100a)$$

$$\Phi_{\perp} = 8\pi \text{Re}[3s_{11} - s_{00}(1 + 2s_{11}^*)], \quad (\beta = \pi/2). \quad (3.100b)$$

Assim como a Eq. (3.96), a Eq. (3.100) também corrobora com resultados anteriores obtidos para uma partícula esférica [Silva 2014], [Bruus 2012], [Gor'kov 1962].

3.6.3 Torque de radiação acústico para uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda

A interação de uma onda acústica com a partícula gera um torque de radiação acústica no referencial da partícula $\boldsymbol{\tau}_p^{rad}$, descrito por [Lopes et al. 2020], [Lima et al. 2020]

$$\boldsymbol{\tau}_p^{rad} = \frac{6\pi\rho_0}{k^3} \text{Im}[\gamma_{\perp}(v_{in,y_p} \mathbf{e}_{x_p} - v_{in,x_p} \mathbf{e}_{y_p})v_{in,z_p}^* + \gamma_{\parallel}v_{in,x_p}v_{in,y_p}^* \mathbf{e}_{z_p}]_{\mathbf{r}_p=\mathbf{0}}, \quad (3.101a)$$

$$\gamma_{\perp} = s_{10}^* + s_{11} + 2s_{11}s_{10}^*, \quad (3.101b)$$

$$\gamma_{\parallel} = s_{11}^* + s_{11} + 2|s_{11}|^2. \quad (3.101c)$$

Onde as quantidades γ_{\perp} e γ_{\parallel} são as funções giroacústicas transversal e axial, nessa ordem. A conversão do torque de radiação para o sistema de laboratório, ocorre por meio do tensor de rotação da Eq. (3.76), além disso, é pratico previamente substituímos a relação entre os campos de velocidade

$$\mathbf{v}_{in,p} = \mathbf{R}^{-1} \cdot \mathbf{v}_{in} \quad (3.102)$$

Para essa tarefa, é bastante útil utilizarmos um software como o MATHEMATICA (Wolfram, Inc., Champaign, IL), assim, substituindo a Eq. (3.102) na Eq. (3.101) e aplicando o tensor de rotação da Eq. (3.76), encontramos

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}^{rad} &= \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\tau}_p^{rad} \\ &= \frac{6\pi\rho_0}{k^3} \text{Im}\{[\gamma_{\perp}(v_{in,y} \cos \beta - v_{in,z} \sin \alpha \sin \beta) \times \\ &\quad \times (v_{in,x}^* \cos \alpha \sin \beta + v_{in,y}^* \sin \alpha \sin \beta + v_{in,z}^* \cos \beta) + \\ &\quad + \gamma_{\parallel} \cos \alpha \sin \beta (v_{in,y}^* \cos \alpha - v_{in,x}^* \sin \alpha) \times \\ &\quad \times (v_{in,x} \cos \alpha \cos \beta + v_{in,y} \sin \alpha \cos \beta - v_{in,z} \sin \beta)] \mathbf{e}_x + \\ &\quad + [\gamma_{\parallel} \sin \alpha \sin \beta (v_{in,y}^* \cos \alpha - v_{in,x}^* \sin \alpha) \times \\ &\quad \times (v_{in,x} \cos \alpha \cos \beta + v_{in,y} \sin \alpha \cos \beta - v_{in,z} \sin \beta) - \\ &\quad - \gamma_{\perp} (v_{in,x} \cos \beta - v_{in,z} \cos \alpha \sin \beta) \times \\ &\quad \times (v_{in,x}^* \cos \alpha \sin \beta + v_{in,y}^* \sin \alpha \sin \beta + v_{in,z}^* \cos \beta)] \mathbf{e}_y + \\ &\quad + [\gamma_{\perp} \sin \beta (v_{in,x} \sin \alpha - v_{in,y} \cos \alpha) \times \\ &\quad \times (v_{in,x}^* \cos \alpha \sin \beta + v_{in,y}^* \sin \alpha \sin \beta + v_{in,z}^* \cos \beta) + \\ &\quad + \gamma_{\parallel} \cos \beta (v_{in,y}^* \cos \alpha - v_{in,x}^* \sin \alpha) \times \\ &\quad \times (v_{in,x} \cos \alpha \cos \beta + v_{in,y} \sin \alpha \cos \beta - v_{in,z} \sin \beta)] \mathbf{e}_z\}_{\mathbf{r}=\mathbf{0}}. \end{aligned} \quad (3.103)$$

Semelhante à força, analisemos o torque de radiação na presença de uma onda acústica plana estacionária ao logo do eixo z caracteriza pelos campos da Eq. (3.92). Dessa forma, na ausência de componentes transversais da velocidade do fluido $v_{in,x} = v_{in,y} = 0$, o torque

de radiação da Eq. (3.103) se reduz em

$$\boldsymbol{\tau}^{rad} = \frac{3\pi\rho_0}{k^3} \text{Im}[\gamma_{\perp}] |v_{in,z}|^2 \sin 2\beta \mathbf{e}_{\alpha}, \quad (3.104a)$$

$$\mathbf{e}_{\alpha} = \cos \alpha \mathbf{e}_y - \sin \alpha \mathbf{e}_x, \quad (3.104b)$$

onde o vetor unitário \mathbf{e}_{α} se apresenta ortogonal ao eixo de simetria da partícula. Agora, inserindo a Eq. (3.92b) na Eq. (3.104a), obtemos

$$\boldsymbol{\tau}^{rad} = \tau_0 \gamma_{\perp}^i \sin^2 kz_0 \sin 2\beta \mathbf{e}_{\alpha}, \quad (3.105a)$$

$$\tau_0 = VE_0, \quad \gamma_{\perp}^i = \frac{12\pi}{Vk^3} \text{Im}[\gamma_{\perp}]. \quad (3.105b)$$

Onde γ_{\perp}^i é o parâmetro giroacústico transversal. A saber, em acustofluídica a escala típica do torque característico é $\tau_0 \sim 1 \text{ nN}\mu\text{m}$.

Como vimos na análise da força, a partícula ficará presa em um nó, ou antinó de pressão, logo o seno é reduzido a um, $\sin^2 kz_0 = 1$. Com isso, a partícula ficará orientado transversalmente ($\beta = \pi/2$) ao eixo da onda, quando o parâmetro giroacústico for positivo, $\gamma_{\perp}^i > 0$, e ficará alinhada paralelo ao eixo da onda quando $\gamma_{\perp}^i < 0$.

Por outro lado, para analisarmos o torque de radiação devido uma onda plana propagante, substituímos a Eq. (3.97b) na Eq. (3.103), chegando em

$$\boldsymbol{\tau}^{rad} = \tau_0 \gamma_{\perp}^i \sin 2\beta \mathbf{e}_{\alpha}. \quad (3.106)$$

Isto é, com exceção do termo senoidal ($\sin^2 kz_0$), esta equação é análoga à equação do torque para uma onda estacionária, Eq. (3.105), então a regra para a orientação da partícula se mantém a mesma da equação anterior.

4

Modelo numérico

Nos capítulos anteriores, mostramos desde equações fundamentais de conservação até soluções do espalhamento de campos acústicos devido a interação com uma dada partícula. No entanto, os métodos analíticos de maneira geral, bem como o apresentado, têm limitações sobretudo quanto à geometria da partícula estudada. Nessas circunstâncias, os métodos numéricos ganham destaque obtendo aproximações satisfatórias para as equações diferenciais parciais (EDPs). Dessa forma, neste capítulo iremos descrever o método numérico utilizado para validar e complementar a teoria apresentada no Cap. 3. Assim apresentaremos de maneira geral o método de elementos finitos (MEF), o qual utilizamos por meio do software de computação numérica COMSOL Multiphysics® [COMSOL 2016], para posteriormente, no capítulo de resultados (Cap. 5), descrevermos os modelos desenvolvidos para obter os resultados numéricos específicos de cada trabalho mencionado.

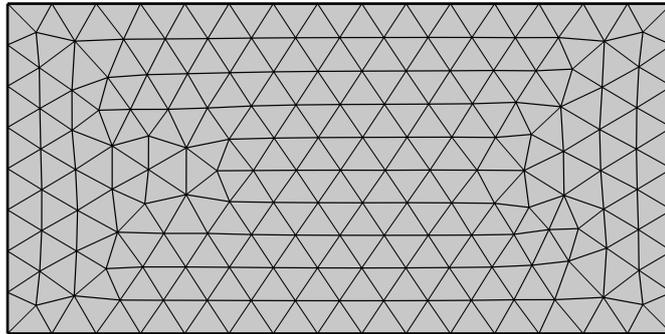
4.1 Método de elementos finitos

Através do método de elementos finitos podemos simplificar problemas de geometrias complexas, utilizando elementos de formato simplista, ao discretizarmos o domínio estudado, tendo uma certa liberdade quanto a dimensão do problema (ver Figs. 4.1 e 4.2). Por simplicidade (e melhor didática), iremos utilizar um exemplo em uma dimensão (1D). Começaremos explicando os conceitos da formulação fraca [COMSOL 2014], depois como ocorre a discretização [COMSOL 2015], e posteriormente como obtemos a solução do problema.

4.1.1 Formulação fraca

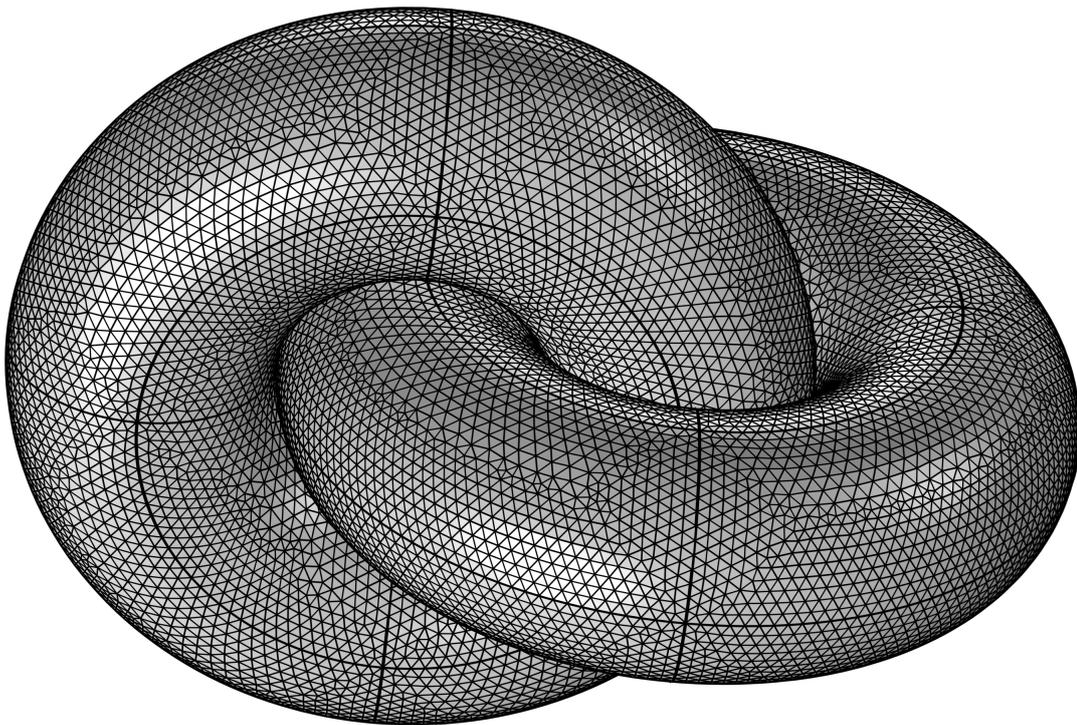
Devido a simplicidade matemática e de conceitos, iremos utilizar como exemplo, uma análise da temperatura em uma dimensão, em estado estacionário, inicialmente, sem fontes de calor. Consideraremos a temperatura $T(x)$ em um intervalo $1 \leq x \leq 5$. Novamente por motivos didáticos, iremos omitir a condutividade térmica (podemos considerar que

Figura 4.1: Demonstração de discretização um domínio com geometria simples (retangular) em 2D.



Fonte: Autor, 2023.

Figura 4.2: Demonstração de discretização de um domínio com geometria mais elaborada em 3D.



Fonte: Autor, 2023.

ela faz parte da unidade de medida). Dessa forma, o fluxo de calor q , no sentido positivo de x é dado por

$$q = -\partial_x T(x), \quad (4.1)$$

onde $\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}$ é a derivada parcial com relação à x . Logo, a conservação do fluxo de calor (dado que não consideramos fontes de calor no domínio) é definido como

$$\partial_x q = 0. \quad (4.2)$$

Ao solucionar as EDPs dadas nas Eqs. (4.1) e (4.2), iremos obter o perfil de temperatura ao longo do domínio. Todavia, esta estrutura de equações é recorrente na física, tal como na eletrostática, ao substituirmos T pelo potencial elétrico e q pelo campo elétrico. Dessa forma, compreendendo a solução dessas equações, entenderemos como são resolvidas qualquer EDPs, via MEF e utilizando a formulação fraca.

Isto posto, note que, ao substituirmos a Eq. (4.1) na Eq. (4.2), temos que a equação é reescrita como a segunda derivada da temperatura T , o que pode causar problemas na solução da mesma. Por exemplo, se considerarmos um domínio com materiais distintos, possuindo condutividades térmicas diferentes, isso provocaria uma descontinuidade na primeira derivada da temperatura T , e conseqüentemente inviabilizando a computação numérica da segunda derivada. Neste cenário, entra em cena a principal virtude da formulação fraca, que tem como principal intuito contornar este problema, pois ao invés de impor uma condição em cada ponto do domínio da solução, como é feito pela equação diferencial, a formulação fraca impõe condições em integrais do domínio da solução, ao transformar a equação diferencial em uma equação integral, retirando assim a carga do algoritmo numérico, durante a análise da equação, como veremos na prática a seguir.

Sendo assim, para aplicarmos esse conceito na Eq. (4.2), para transformar a mesma em uma equação integral, é natural pensarmos simplesmente em integrar a função em todo o domínio, $1 \leq x \leq 5$, como:

$$\int_1^5 \partial_x q(x) dx = 0, \quad (4.3)$$

todavia, isso iria nos garantir apenas que a média de $\partial_x q$ no domínio é zero, ao passo que a equação diferencial inicial nos assegura que $\partial_x q$ é nula em cada ponto do domínio. Com o intuito de entendermos como contornar esse problema, à priori, analisemos um pequeno "elemento" do domínio, tal como

$$\int_{1,99}^{2,01} \partial_x q(x) dx = 0, \quad (4.4)$$

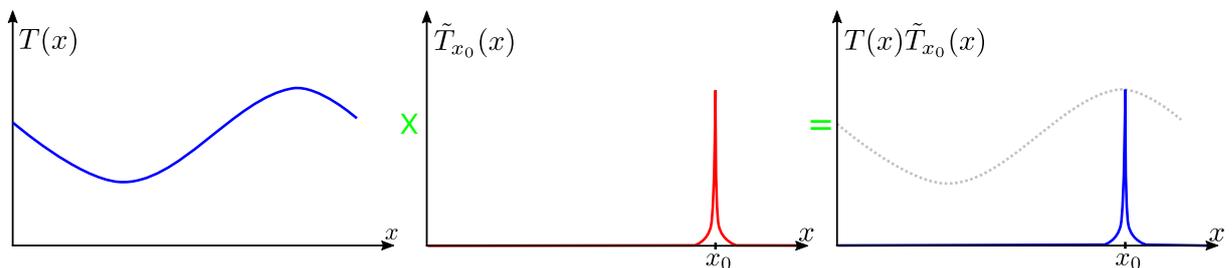
o qual nos fornece o valor de $\partial_x q$ em torno de $x = 2,0$, isto é, $\partial_x q(2,0) \approx 0$. Aplicando essa conceito em todo o domínio, de maneira a aproximarmos a equação diferencial inicial em termos de integrais de pequenos elementos do domínio, como

$$\int_{1,0}^{1,01} \partial_x q(x) dx = 0, \int_{1,01}^{1,02} \partial_x q(x) dx = 0, \int_{1,02}^{1,03} \partial_x q(x) dx = 0 \dots, \quad (4.5)$$

de modo que, quanto maior o número de elementos (integrais) e menor o tamanho deles (do intervalo), mais precisa será a aproximação. Entretanto, é impraticável escrevermos todas essas integrais, contudo podemos representar o mesmo conceito de outra maneira. Como o intuito da Eq. (4.4) é restringir o valor de $\partial_x q$ em um intervalo estreito (em um pequeno

elemento do domínio), obtemos um resultado análogo ao multiplicarmos o integrando por uma função teste $\tilde{T}_{2,0}(x)$ (optamos por utilizar esse símbolo para provocarmos uma assimilação direta da relação entre a função T e a sua função teste \tilde{T} associada), a qual é definida no elemento (ou intervalo) especificado e nula para qualquer ponto fora dele, como exemplificado na Fig. 4.3.

Figura 4.3: Demonstração da aplicação de uma função de teste, onde a primeira curva ($T(x)$) é multiplicada por uma função de teste genérica representada na segunda curva ($\tilde{T}_{x_0}(x)$), a qual é estabelecida somente nas proximidades de um determinado ponto x_0 , o resultado da multiplicação é apresentado na terceira curva.



Fonte: Autor, 2023.

Assim, por meio dessa nova abordagem podemos integrar em todo o domínio, $1 \leq x \leq 5$, adotando uma função teste generalizada $\tilde{T}(x)$, a qual é dada pela combinação de várias funções teste ($\tilde{T}_{1,0}, \tilde{T}_{1,01}, \dots$), sendo cada uma centrada em um dado elemento (ou pequeno intervalo) do domínio. Dessa forma, temos a equação original na formulação fraca, dada por:

$$\int_1^5 \partial_x q(x) \tilde{T}(x) dx = 0, \quad (4.6)$$

de modo que, podemos escolher funções testes que mais se adéquem aos nosso problema, facilitando a obtenção da solução do mesmo.

Reduzindo a ordem de diferenciação

A ordem da derivada ainda permanece a mesma, uma vez que não alteramos a função principal da Eq. (4.2), mas agora que inserimos a função em uma integral isso pode ser resolvido facilmente, simplesmente utilizando o método de integração por partes, o que nos fornece

$$q(x=5)\tilde{T}(x=5) - q(x=1)\tilde{T}(x=1) - \int_1^5 q(x)\partial_x \tilde{T}(x) dx = 0. \quad (4.7)$$

Onde finalmente tivemos a ordem da derivada reduzida, pois foi transferida do fluxo de calor (o qual já contempla uma derivada da temperatura, Eq. (4.1)), para a função de teste. Considerando que a função de teste é apenas um artifício para obtermos a solução

da equação, ela pode ser escolhida de modo a não causar problemas com relação a sua derivação.

Condição de contorno de *Neumann*

O fluxo de calor e a função de teste nos limites do domínio, $x = 1$ e $x = 5$, estão relacionados através dos dois primeiros termos da Eq. (4.7), dessa forma, tomando o fluxo de calor q no sentido positivo de x , podemos expressar o fluxo de calor em termos dos fluxos de saída, como

$$\int_1^5 \partial_x T(x) \partial_x \tilde{T}(x) dx = -\Lambda_1 \tilde{T}_1 - \Lambda_2 \tilde{T}_2, \quad (4.8)$$

onde Λ representa os fluxos de saída e os subscritos 1 e 2 fazem referência aos limites do domínio, $x = 1$ e $x = 5$, nessa ordem, nos fornecendo as seguintes correlações:

$$\Lambda_1 \equiv -q(x = 1), \Lambda_2 \equiv +q(x = 5), \tilde{T}_1 \equiv \tilde{T}(x = 1), \tilde{T}_2 \equiv \tilde{T}(x = 5), \quad (4.9)$$

note que, também substituímos o fluxo de calor, Eq. (4.1), no integrando, estando agora com a integral em termos da temperatura T , e sua função de teste \tilde{T} correspondente.

Com isso, através do lado direito da Eq. (4.8) podemos definir de maneira direta as condições de contorno em termos do fluxo de calor. A título de exemplo, se definirmos $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 0$, estabelecemos o isolamento térmico, dado que zeramos o fluxo de calor nos limites do domínio. Em outras palavras, ao estabelecermos uma condição de contorno definindo um fluxo nos limites de um domínio, estamos especificando uma condição de contorno do tipo, condição de contorno de *Neumann*.

Condição de contorno de *Dirichlet*

Diferente da condição de contorno de *Neumann*, onde fixamos a primeira derivada da variável a ser resolvida, na condição de contorno de *Dirichlet*, nós fixamos explicitamente a variável a ser encontrada, em nosso exemplo a temperatura T , também nos limites do domínio (representado pelo lado direito da Eq. (4.8)).

Assim como na condição de contorno de *Neumann*, onde a formulação fraca nos permite definir de forma direta o fluxo nos contornos do domínio. Na condição de contorno de *Dirichlet*, podemos fixar uma temperatura ao compensar o fluxo de calor interno com um fluxo externo, ao atribuirmos uma outra função teste ($\tilde{\lambda}$) associada a esse fluxo, com esta finalidade.

Exemplificando, se definirmos um fluxo qualquer em um dos contornos, por exemplo no limite 1 ($x = 1$), com $\Lambda_1 = 2$, ao passo que pretendemos fixar uma temperatura no limite 2 ($x = 5$). Assim, se queremos fixar a temperatura em $T = 11$ (em unidades arbitrárias) no limite 2, nós introduzimos uma nova variável de fluxo de saída (desconhecida) $\Lambda_2 = \lambda_2$,

e uma função de teste associada $\tilde{\lambda}_2$, assim, partindo da Eq. (4.8) temos que

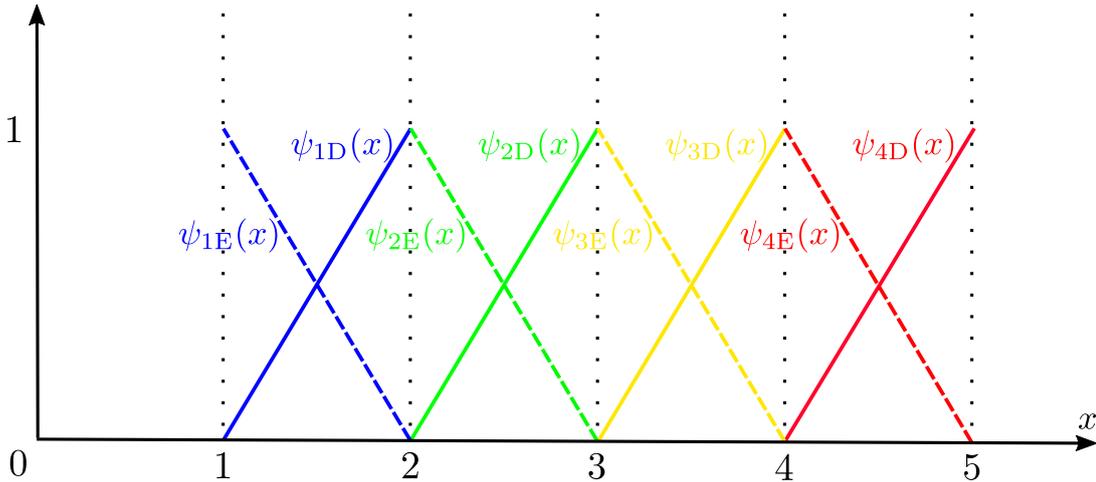
$$\int_1^5 \partial_x T(x) \partial_x \tilde{T}(x) dx = -2\tilde{T}_1 - \lambda_2 \tilde{T}_2 - (T_2 - 11)\tilde{\lambda}_2, \quad (4.10)$$

onde o primeiro termo do lado direito fixa o fluxo de saída em 2 no limite $x = 1$, o segundo representa o fluxo de saída desconhecido, λ_2 , no limite $x = 5$, e o terceiro termo impõe que a solução seja $T = 11$ no limite $x = 5$, através da função de teste $\tilde{\lambda}_2$, seguindo o mesmo conceito da função de teste $\tilde{T}(x)$.

4.1.2 Discretizando equações na formulação fraca

Retomando nosso exemplo de calor em 1D, iremos agora nos focar em demonstrar uma maneira de resolver numericamente a Eq. (4.10). Para tal, começaremos subdividindo o domínio $1 \leq x \leq 5$ em quatro subintervalos (ou elementos de discretização), os quais estão interligados por cinco nós (os pontos 1, 2, 3, 4 e 5). Dessa forma, nos é permitido definir um conjunto de funções de base (ψ_{1E} , ψ_{1D} , ψ_{2E} , ψ_{2D} , ψ_{3E} , ψ_{3D} , ψ_{4E} , ψ_{4D}), por simplicidade utilizaremos funções lineares (polinômios de ordem superiores também podem ser utilizados, por exemplo), sendo estipuladas duas funções por cada elemento, como demonstrado na Fig. 4.4.

Figura 4.4: Representação de funções de base lineares (ψ_{1E} , ψ_{1D} , ψ_{2E} , ...), as quais são definidas apenas em um dos subintervalos (ou elementos) do domínio, delimitados pelos nós (1, 2, 3, 4 e 5), e são nulas nos demais.



Fonte: autor, 2023.

Assim, a título de exemplo, para o primeiro elemento ($1 \leq x \leq 2$), temos as funções de base a seguir:

$$\psi_{1E}(x) = \begin{cases} 2 - x, & \text{para } 1 \leq x \leq 2; \\ 0, & \text{para outros valores de } x \end{cases} \quad (4.11)$$

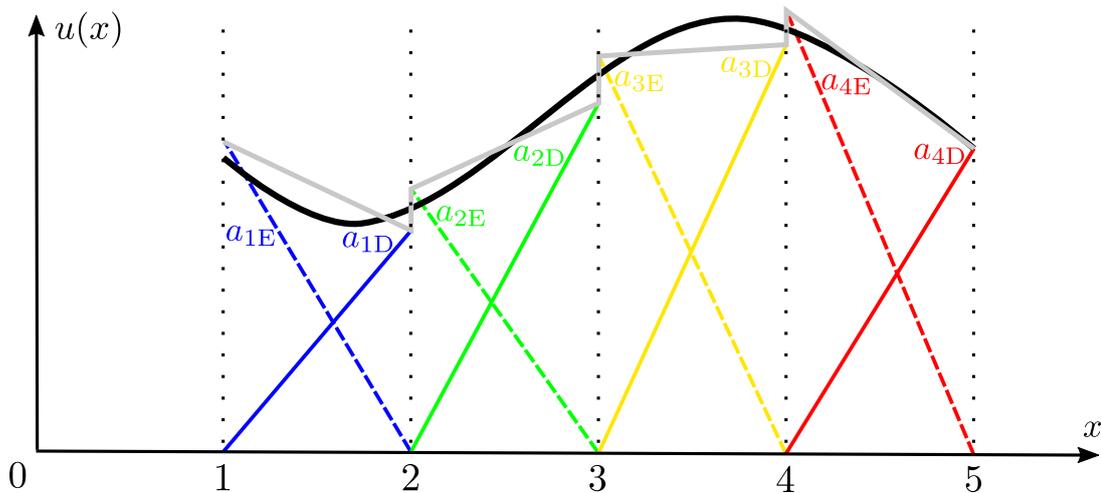
$$\psi_{1D}(x) = \begin{cases} x - 1, & \text{para } 1 \leq x \leq 2; \\ 0, & \text{para outros valores de } x. \end{cases} \quad (4.12)$$

Dessa forma, cada função de base varia de 0 a 1 no intervalo do seu respectivo elemento e é nula no restante do domínio. Assim, podemos representar qualquer função arbitrária ($u(x)$) definida no domínio, $1 \leq x \leq 5$, por meio de uma combinação linear dessas funções de base:

$$u(x) \approx a_{1E}\psi_{1E}(x) + a_{1D}\psi_{1D}(x) + a_{2E}\psi_{2E}(x) + a_{2D}\psi_{2D}(x) + \dots, \quad (4.13)$$

onde a_{1E} , a_{1D} , a_{2E} , a_{2D} , ... são os coeficientes (a serem determinados) para cada função de base. Podemos ver na Fig. 4.5, uma representação de uma curva arbitrária $u(x)$ (curva na cor preta), ao mesmo tempo que vemos uma aproximação representada pela curva de cor cinza, a qual é definida pela superposição das funções de base da Eq. (4.13). As

Figura 4.5: Demonstração ilustrativa de uma aproximação representada através de funções de base lineares, note a aproximação é estabelecida conforme obtemos os coeficientes (a_{1E} , a_{1D} , a_{2E} , ...).



Fonte: autor, 2023.

aproximações descritas por meio da Eq. (4.13) admitem descontinuidades abruptas em elementos vizinhos (como podemos observar na Fig. 4.5), com o intuito de evitar esse problema, usualmente em grande parte das interfaces físicas as funções de base padrão são elementos de Lagrange, o que restringe os coeficientes das funções de base, reduzindo as descontinuidades das funções nas intersecções dos elementos vizinhos. Ilustramos essa abordagem na Fig. 4.6, onde os elementos adjacentes compartilham os mesmos coeficientes, ou seja,

$$a_{1D} = a_{2E}, \quad a_{2D} = a_{3E}, \quad a_{3D} = a_{4E}, \quad (4.14)$$

nos permitindo renomear esses coeficientes da seguinte forma:

$$a_1 \equiv a_{1E}, \quad (4.15a)$$

$$a_2 \equiv a_{1D} = a_{2E}, \quad (4.15b)$$

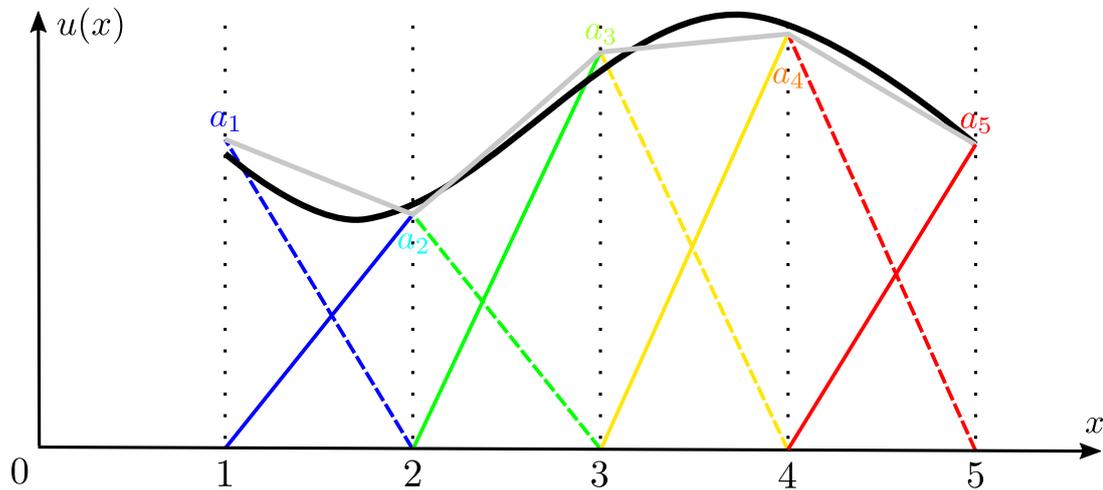
$$a_3 \equiv a_{2D} = a_{3E}, \quad (4.15c)$$

$$a_4 \equiv a_{3D} = a_{4E}, \quad (4.15d)$$

$$a_5 \equiv a_{4D}. \quad (4.15e)$$

Assim, podemos reescrever a Eq. (4.13) através das Eqs. (4.15a)-(4.15e), como:

Figura 4.6: Demonstração ilustrativa de uma aproximação obtida através de funções de base lineares, agora aplicando a condição de elementos de Lagrange.



Fonte: autor, 2023.

$$u(x) \approx a_1[\psi_{1E}(x)] + a_2[\psi_{1D}(x) + \psi_{2E}(x)] + a_3[\psi_{2D}(x) + \psi_{3E}(x)] + \dots \quad (4.16)$$

Adicionalmente, nos é permitido simplificar a Eq. (4.16) combinando os pares de funções dispostas nos colchetes, resultando em um novo conjunto de funções de base $\phi_1(x)$, $\phi_2(x)$, $\phi_3(x)$, $\phi_4(x)$, e $\phi_5(x)$, onde cada uma delas está centrada em um respectivo ponto nodal, conforme ilustradas na Fig. 4.7, e descritas abaixo:

$$\phi_1(x) \equiv \psi_{1E}(x) = \begin{cases} 2 - x, & \text{para } 1 \leq x \leq 2; \\ 0, & \text{para outros valores de } x. \end{cases} \quad (4.17)$$

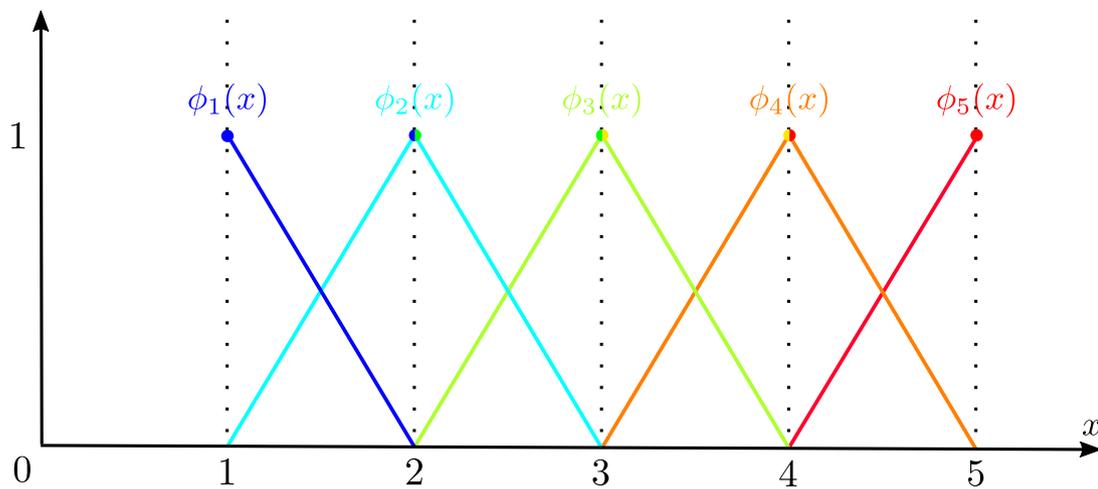
$$\phi_2(x) \equiv \psi_{1D}(x) + \psi_{2E}(x) = \begin{cases} x - 1, & \text{para } 1 \leq x \leq 2; \\ 3 - x, & \text{para } 2 \leq x \leq 3; \\ 0, & \text{para outros valores de } x. \end{cases} \quad (4.18)$$

$$\phi_3(x) \equiv \psi_{2D}(x) + \psi_{3E}(x) = \begin{cases} x - 2, & \text{para } 2 \leq x \leq 3; \\ 4 - x, & \text{para } 3 \leq x \leq 4; \\ 0, & \text{para outros valores de } x. \end{cases} \quad (4.19)$$

$$\phi_4(x) \equiv \psi_{3D}(x) + \psi_{4E}(x) = \begin{cases} x - 3, & \text{para } 3 \leq x \leq 4; \\ 5 - x, & \text{para } 4 \leq x \leq 5; \\ 0, & \text{para outros valores de } x. \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\phi_5(x) \equiv \psi_{4D}(x) = \begin{cases} x - 4, & \text{para } 4 \leq x \leq 5; \\ 0, & \text{para outros valores de } x. \end{cases} \quad (4.21)$$

Figura 4.7: Representação do reagrupamento de funções de base adjacentes, que compartilham um mesmo nó.



Fonte: autor, 2023.

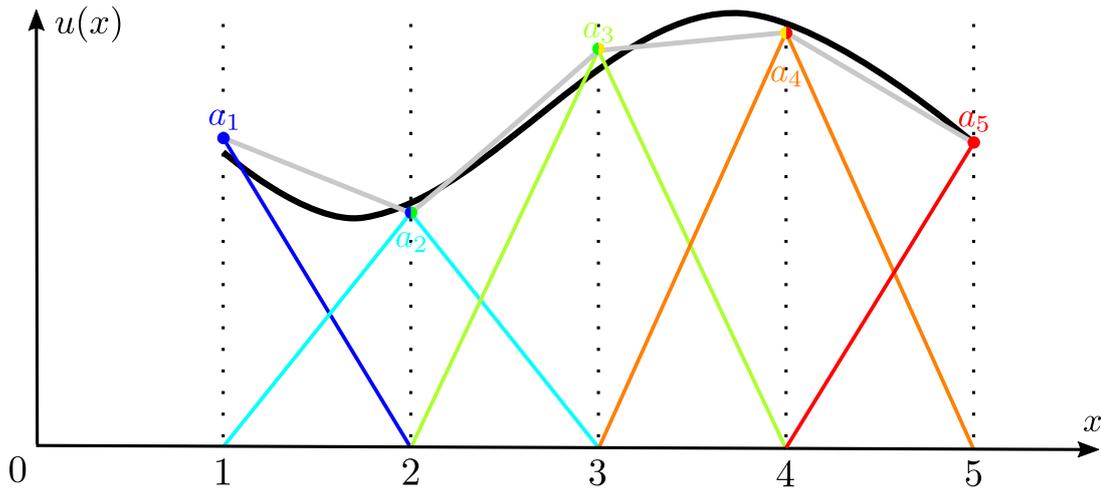
Observe que, nesta simplificação, as funções nodais constituem essencialmente triângulos e variam de zero a um, se anulando fora dos intervalos de seus respectivos elementos (conforme ilustrado na Fig. 4.7). Com base nessas novas funções nodais, a aproximação da Eq. (4.16) é descrita como

$$u(x) \approx a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) + a_3\phi_3(x) + a_4\phi_4(x) + a_5\phi_5(x). \quad (4.22)$$

Apresentamos, na Fig. 4.8, a curva arbitrária $u(x)$ (em preto) e sua estimativa (em cinza), agora a partir das funções nodais de base (com a mesma paleta de cores empregada na Fig. 4.7). Embora este seja apenas um exemplo com propósitos didáticos, é possível notar que a aproximação atual, com a discretização (ou malha) estabelecida, não é tão precisa. Podemos notar, que a liberdade dos coeficientes nodais (a_1, a_2, \dots) também afetam a precisão da aproximação, pois eles não são obrigados a seguir precisamente a solução exata, exceto quando estão sujeitos a uma condição de contorno (como no caso de

a_5 , fixado nas figuras para exemplificar uma condição de contorno aplicada). Portanto, um estudo de refinamento da malha é essencial para assegurar uma melhor precisão dos resultados obtidos nas simulações [COMSOL 2016].

Figura 4.8: Demonstração ilustrativa de uma aproximação dada por funções de base nodais.



Fonte: autor, 2023.

4.1.3 Solução de equações discretizadas na formulação fraca

Após exemplificarmos como descrever uma função qualquer por meio de funções de base, podemos empregar esse conceito na Eq. (4.10). Desse modo, tornando viável aproximar a função de temperatura $T(x)$ utilizando um conjunto de funções de base de forma similar à Eq. (4.22):

$$T(x) \approx a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) + a_3\phi_3(x) + a_4\phi_4(x) + a_5\phi_5(x), \quad (4.23)$$

sendo os coeficientes a_1 , a_2 , a_3 , a_4 e a_5 , termos desconhecidos a serem determinados.

Substituindo a Eq. (4.23) na Eq. (4.10), temos

$$\begin{aligned} & a_1 \int_1^5 \partial_x \phi_1(x) \partial_x \tilde{T}(x) \, dx + a_2 \int_1^5 \partial_x \phi_2(x) \partial_x \tilde{T}(x) \, dx + \dots + \\ & + a_5 \int_1^5 \partial_x \phi_5(x) \partial_x \tilde{T}(x) \, dx = -2\tilde{T}_1 - \lambda_2 \tilde{T}_2 - (a_5 - 11)\tilde{\lambda}_2, \end{aligned} \quad (4.24)$$

como a T_2 representa a temperatura no limite direito do domínio e as funções de base são funções localizadas, podemos inferir a partir da Eq. (4.23) que $T_2 = T(x=5) = a_5\phi_5(x=5) = a_5$ (ver Fig. 4.8).

Dessa forma, temos seis graus de liberdade restantes, sendo cinco coeficientes a_1 , a_2 , a_3 , a_4 e a_5 , além do fluxo λ_2 no limite direito do domínio. Então, são necessárias seis equações para resolver essas seis incógnitas. Para isso, utilizaremos as funções de base, através da função de teste. Como elucidado anteriormente, a função de teste visa limitar a solução em um intervalo específico, anulando a solução para o restante do domínio, estendendo esse conceito intervalo por intervalo até cobrir todo o domínio. Assim, com esse intuito, podemos empregar o nosso conjunto de funções de base, $\phi_1(x)$, $\phi_2(x)$, \dots , $\phi_5(x)$, facilmente ao substituí-las de forma direta na função de teste \tilde{T} da Eq. (4.24), para obtermos as equações necessárias.

Tabela 4.1: Substituições empregadas nas funções de teste.

\tilde{T}	$\tilde{\lambda}_2$
ϕ_1	0
ϕ_2	0
ϕ_3	0
ϕ_4	0
ϕ_5	0
0	1

A Tab. 4.1 apresenta as substituições a serem aplicadas nas funções de teste para obtermos as seis equações necessárias. Vale ressaltar, que a utilização de funções localizadas torna essa etapa bastante eficiente, pois cada substituição gera uma equação com um número restrito de termos, como exemplificaremos a seguir. Onde, a primeira substituição resulta em:

$$\begin{aligned}
 & a_1 \int_1^5 \partial_x \phi_1(x) \partial_x \phi_1(x) \, dx + a_2 \int_1^5 \partial_x \phi_2(x) \partial_x \phi_1(x) \, dx + \dots + \\
 & + a_5 \int_1^5 \partial_x \phi_5(x) \partial_x \phi_1(x) \, dx = -2\phi_1(x=1) - \lambda_2 \phi_1(x=5) - (a_5 - 11)0.
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Observe que ϕ_1 não é nulo somente no intervalo compartilhado com ϕ_2 , além de com ele mesmo. Portanto, somente os dois primeiros termos do lado esquerdo da equação possuem valor que difere de zero. Em relação ao lado direito, como ϕ_1 é localizado somente à esquerda do domínio, o segundo termo do lado direito é anulado, $\phi_1(x=5) = 0$. Portanto, obtemos a seguinte equação:

$$a_1 - a_2 = -2, \tag{4.26}$$

onde, efetuamos o cálculo das integrais que permaneceram ao substituir as funções dadas nas Eqs. (4.17) e (4.18), resultando em:

$$\int_1^5 \partial_x \phi_1(x) \partial_x \phi_1(x) dx = 1, \quad (4.27a)$$

$$\int_1^5 \partial_x \phi_2(x) \partial_x \phi_1(x) dx = -1, \quad (4.27b)$$

Além de utilizarmos a definição da função ϕ_1 no limite esquerdo, isto é, $\phi_1 = 1$. De maneira semelhante, também podemos empregar as outras cinco substituições apresentadas na Tabela 4.1, as quais resultam nas seguintes equações:

$$-a_1 + 2a_2 - a_3 = 0, \quad (4.28)$$

$$-a_2 + 2a_3 - a_4 = 0, \quad (4.29)$$

$$-a_3 + 2a_4 - a_5 = 0, \quad (4.30)$$

$$-a_4 + a_5 = -\lambda_2, \quad (4.31)$$

$$0 = -(a_5 - 11). \quad (4.32)$$

Dessa forma, utilizando as Equações (4.26), (4.28)-(4.32), temos um sistema de seis equações com seis incógnitas. Tal sistema é completamente solucionável, permitindo-nos obter:

$$a_1 = 3, \quad (4.33a)$$

$$a_2 = 5, \quad (4.33b)$$

$$a_3 = 7, \quad (4.33c)$$

$$a_4 = 9, \quad (4.33d)$$

$$a_5 = 11, \quad (4.33e)$$

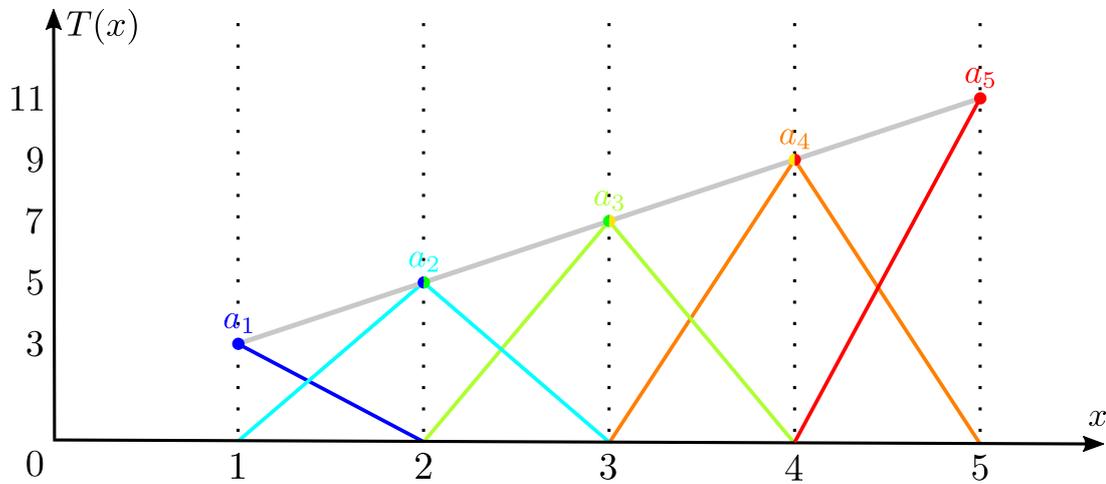
$$\lambda_2 = -2. \quad (4.33f)$$

Enfim, ao substituirmos as Eqs. (4.33a)-(4.33e), na Eq. (4.23), encontramos uma aproximação para a solução da EDP (lembrando que a baixa resolução da aproximação se dá pelo intuito exclusivamente didático do exemplo):

$$T(x) \approx 3\phi_1(x) + 5\phi_2(x) + 7\phi_3(x) + 9\phi_4(x) + 11\phi_5(x). \quad (4.34)$$

Uma representação gráfica da aproximação da solução, pode ser visualizada na Fig. 4.9. É interessante ressaltar que, o termo λ_2 não faz parte da solução explicitamente, uma vez que o mesmo é apenas um artifício para obtermos a temperatura que pretendemos ter como condição de contorno. Podemos fazer uma verificação rápida da solução que encontramos,

Figura 4.9: Representação gráfica da aproximação da solução do exemplo de temperatura em 1D, baseada em funções lineares nodais.



Fonte: autor, 2023.

ao averiguarmos a temperatura que temos no limite direito do nosso domínio:

$$\begin{aligned}
 T(x=5) &\approx 3\phi_1(x=5) + 5\phi_2(x=5) + 7\phi_3(x=5) + 9\phi_4(x=5) + 11\phi_5(x=5) \\
 &= -9 \cdot 0 + -3 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 9 \cdot 0 + 11 \cdot 1 \\
 &= 11.
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

A qual segue precisamente a condição de contorno de Dirichlet que estabelecemos na Sec. 4.1.1, onde definimos que a temperatura no limite direito deveria ter valor igual à 11, como verificado.

Representação matricial

A fim de ampliarmos nossa percepção da eficiência do método, podemos apresentar o sistema das Eq. (4.26), (4.28)-(4.32), através de uma representação matricial:

$$\begin{pmatrix}
 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 a_1 \\
 a_2 \\
 a_3 \\
 a_4 \\
 a_5 \\
 \lambda_2
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 -2 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 11
 \end{pmatrix} \tag{4.36}$$

Nesse formato, torna-se mais notável a quantidade de zeros que conseguimos obter ao utilizarmos funções localizadas. Tal vantagem é ainda mais ressaltada em aplicações reais, um vez que usualmente são utilizadas malhas com um número de elementos extremamente

maior do que o nosso simples exemplo didático em uma dimensão, o qual foi subdividido em somente quatro segmentos.

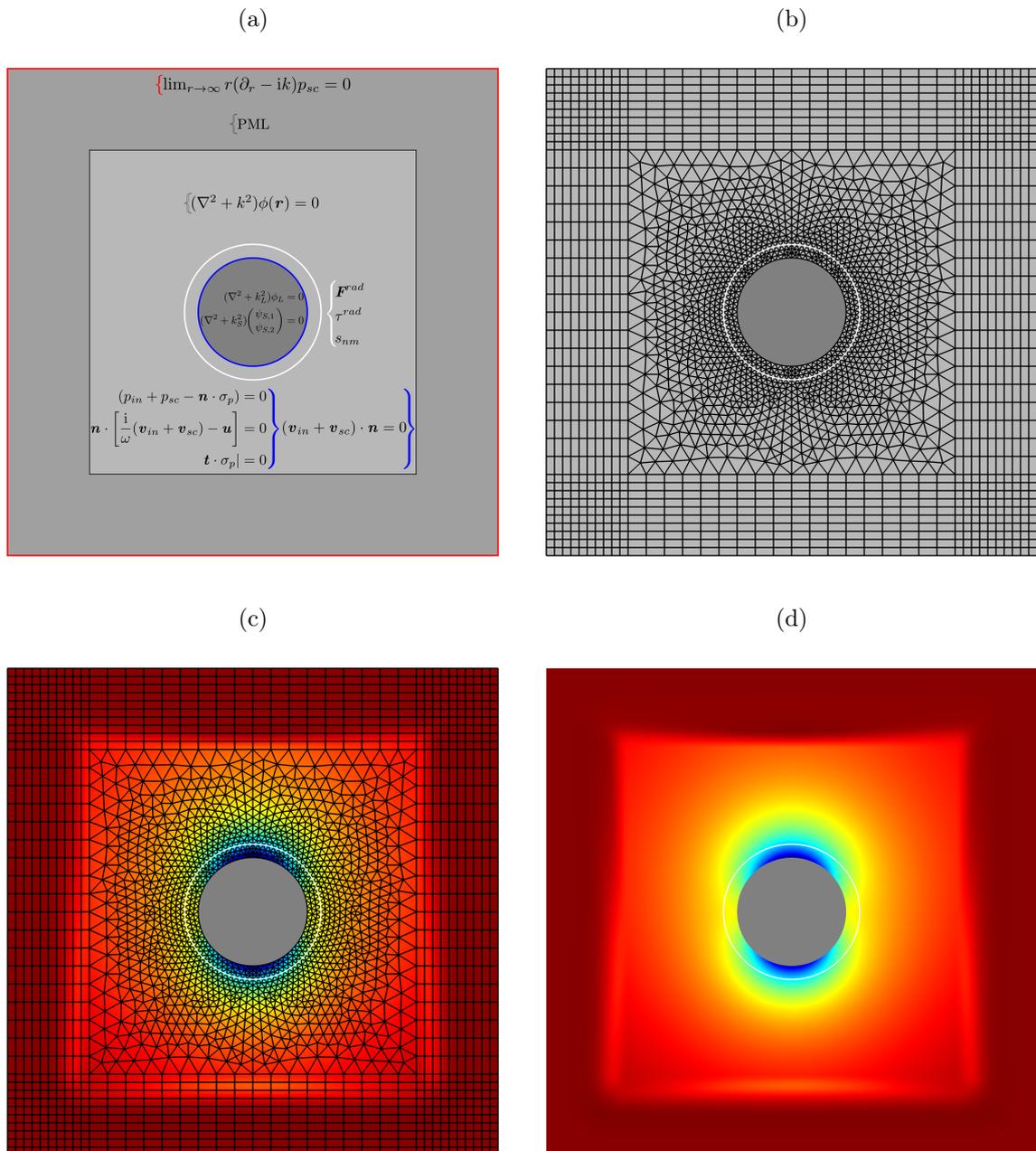
4.1.4 Comentários sobre a formulação fraca em dimensões superiores

Apesar de termos optado por delimitar nossas explicações a um exemplo em um dimensão (1D), com o intuito de priorizar o entendimento do conceito, não o deixando mais difícil de ser assimilado devido uma matemática mais rebuscada, os conceitos aqui expostos são completamente válidos em duas ou três dimensões (2D ou 3D). Recapitulando, a formulação fraca converte uma equação originalmente diferencial em uma equação integral. Então, através da integração por partes, a ordem da diferenciação é reduzida, contornando obstáculos na computação numérica e permite que as condições de contorno de fluxo nos limites do domínio possam ser definidas de maneira direta. Fazendo uma analogia, enquanto os limites no caso 1D são pontos, em dimensões mais altas, o processo de integração por partes, usufruindo do teorema de divergência, Eq. (2.7), gera como limites uma linha fechada (no caso 2D) e uma superfície fechada (no caso 3D), ambos envolvendo seus respectivos domínios. Dessa forma, o lado direito da Eq. (4.8) é convertido em uma integral de linha (no caso 2D) ou de superfície (no caso 3D) da densidade de fluxo de saída.

Na Fig. 4.10, podemos visualizar uma demonstração da solução da equação diferencial de Helmholtz, via método de elementos finitos, em um domínio discretizado em 2D. Na Fig. 4.10.a, temos as equações de Helmholtz (ver Cap. 2) para um meio sólido demarcado pelo círculo azul (que representa uma partícula esférica) e para um meio fluido (região quadrada que circunda a partícula), nos colchetes azuis temos as condições de contorno aplicadas na superfície da partícula, sendo a do primeiro colchete, uma condição de continuidade utilizada quando a onda é transmitida do meio líquido para o meio sólido (e vice-versa), e no segundo colchete, temos uma condição de contorno de rigidez para quando a onda é totalmente refletida, ou seja quando não é transmitida para o outro meio (neste exemplo utilizamos essa condição), no quadrado externo podemos definir uma região para atenuar as ondas de saída (ou espalhadas), denominada de PML (ver apêndice A), ou como alternativa podemos definir uma condição de contorno de Sommerfeld (Eq. 3.17) na extremidade do domínio (destacada em vermelho), e através do círculo branco delimitamos uma região de interesse, o qual também pode ser usado para computar o campo espalhado, que utilizamos para calcular a força e o torque de radiação acústica, bem como os coeficientes de espalhamento (ver Cap. 3). Na Fig. 4.10.b, temos um exemplo de discretização com elementos triangulares e retangulares, observe a maior densidade de elementos da malha na região de interesse (onde ocorrerá o espalhamento da onda) e menor densidade conforme aumenta a distância da região de interesse. Na Fig. 4.10.c,

definimos uma onda plana propagante ascendente no domínio fluídico, e obtemos a solução da equação de Helmholtz a partir das condições de contorno estabelecidas (de rigidez na superfície da esfera e PML na região quadrada externa). Na 4.10.d, finalmente temos o resultado final interpolado, onde vemos a parte real da pressão espalhada pela esfera rígida. Ao longo do Cap. 5, iremos descrever com mais detalhes as simulações que foram utilizadas na obtenção dos resultados numéricos de cada trabalho de força e torque de radiação acústica.

Figura 4.10: Demonstração do processo de discretização e resolução de equações diferenciais via método de elementos finitos em um domínio 2D. Na figura (a), temos um domínio quadrado, com um círculo centralizado (simbolizando uma partícula esférica rígida), temos as equações diferenciais a serem resolvidas e as condições de contorno para cada região. Na figura (b), temos exemplo de malha 2D, note que a densidade de malha é mais acentuada em uma região demarcada pelo círculo branco, destacando a região de interesse, já a região das bordas (menos densa) com elementos retangulares, representa um domínio onde definimos uma região de atenuação de onda acústica. Na figura (c), definimos uma onda acústica plana acendente no meio, então obtemos a solução via método de elementos finitos da equação de Helmholtz para a onda espalhada pela partícula rígida centralizada. Finalmente na figura (d) temos o resultado final interpolado.



5

Resultados e discussões

Quando partículas encontram-se imersas em um fluido contendo uma onda acústica, essas partículas podem sofrer os fenômenos de força e torque de radiação acústica. Tais fenômenos têm sido amplamente utilizados em aplicações com biotecnologia, na manipulação de células e outros microrganismos [Collins et al. 2015], [Silva et al. 2019]. Quando consideramos partículas de geometria simplista, sem anisotropia, ou seja, esferas, a teoria dos campos de força e torque de radiação acústica está bem estabelecida [Gor'kov 1962], [Silva 2014]. No entanto, a maioria dos microrganismos possui algum nível de anisotropia, dificultando a obtenção de teorias generalistas que contemplem tais partículas. Aqui, primeiramente, apresentaremos na seção a seguir, as simulações via método de elementos finitos (o qual foi introduzido no Cap. 4) que validam a teoria apresentada na Sec. 3.4 (homônoma), ambos os resultados (numéricos e analíticos) traduzem a força e o torque de radiação acústica em um esferoide de subcomprimento de onda ao interagir com uma onda acústica qualquer, a título de exemplo utilizamos duas ondas planas cruzadas (ver Sec. 3.4.4). Na seção seguinte, Sec. 5.2, apresentamos os parâmetros utilizados nas simulação de transferência de spin para um esferoide a partir de um feixe acústico de Bessel com vorticidade de primeira ordem, onde teremos a comparação entre os resultados numéricos e analíticos (Sec. 3.5). Por fim, na Sec. 5.3, temos os resultados para uma teoria semi-analítica mais inclusiva, que contempla a força e o torque de radiação acústica para qualquer partícula axissimétrica de subcomprimento de onda, a teoria teve sua formulação apresentada na Sec. 3.6 e será complementada pelo modelo numérico que será detalhado na referida seção, comparamos nossa teoria com resultados exatos já conhecidos para uma esfera rígida em água, bem como apresentamos previsões para um glóbulo vermelho em plasma sanguíneo.

5.1 Interação não linear de ondas acústicas com uma partícula esferoidal: Efeitos de força e torque de radiação

As simulações de interação não linear com uma partícula esferoidal foram realizadas utilizando o modelo 3D, com o módulo de pressão acústica, com a frequência como domínio. O domínio geométrico das simulações foi demarcado por uma região esférica. No centro dessa esfera, está situada a partícula esferoidal (ver Fig. 5.1). Uma região de superfície esférica, denotada por S_1 , foi definida próxima à partícula, onde efetuaremos a integração para computar a força e torque de radiação, como descrito nas Eq. (3.13) e (3.15), respectivamente:

$$\mathbf{F}^{rad} = \int_{S_1} \left[\left(\frac{\overline{p^2}}{2\rho_0 c_0^2} - \frac{\rho_0 \overline{v^2}}{2} \right) \mathbf{I} + \rho_0 \overline{\mathbf{v}\mathbf{v}} \right] \cdot \mathbf{n} \, d^2 \mathbf{r},$$

$$\boldsymbol{\tau}^{rad} = - \int_{S_1} (\mathbf{r} \times \rho_0 \overline{\mathbf{v}\mathbf{v}}) \cdot \mathbf{n} \, dS_1$$

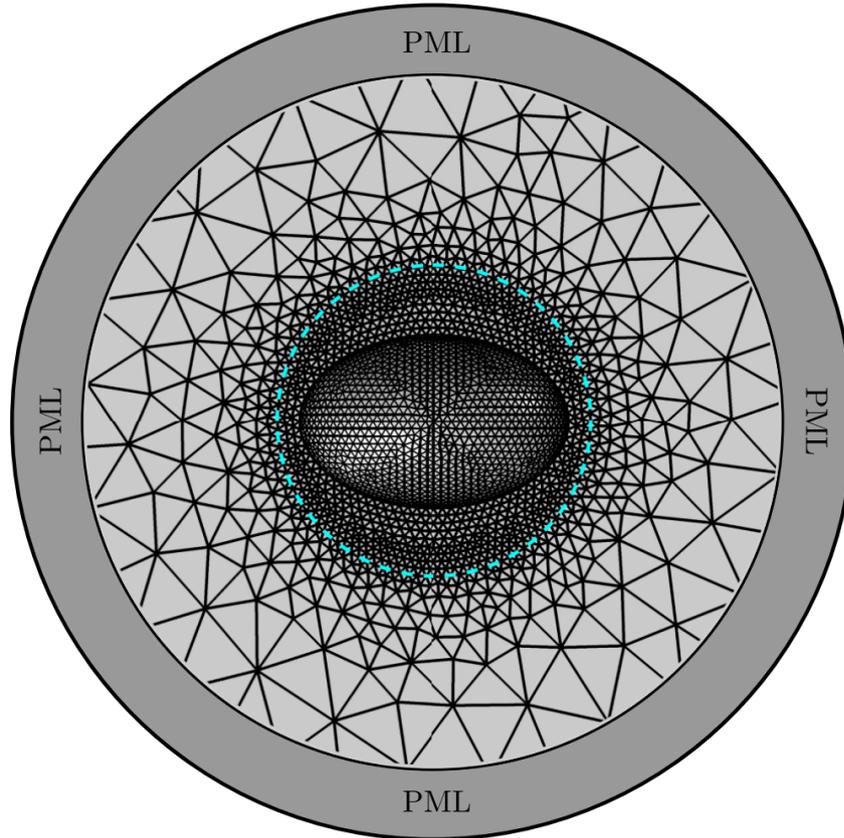
Recordando que esses campos são dados pela soma das componentes incidentes e espalhados, ou seja, $p = p_{in} + p_{sc}$ e $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{in} + \mathbf{v}_{sc}$. Nomeamos o volume entre a superfície da partícula S_0 e a superfície esférica S_1 , de V_1 . Uma equivalência à condição de radiação de Sommerfeld apresentada na Eq. (3.17) para as ondas espalhadas, foi estabelecida por meio de uma perfectly matched layer (PML). Definimos a condição de contorno de rigidez na superfície da partícula, como definido na Eq. (3.30):

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}|_{\mathbf{r} \in S_0} = 0,$$

especificamos o feixe incidente como pressão de fundo no domínio que contempla a partícula. Após a interação onda-partícula, os campos de pressão e velocidade do fluido foram computados para calcular a força e torque de radiação acústica. Utilizamos uma amplitude de pressão $p_0 = 100$ kPa, embasados em valores anteriormente relatados em dispositivos acustofluídicos [Lee e Wang 1989].

Buscando maior acurácia e confirmação dos resultados obtidos numericamente, realizamos testes de convergência de malha, onde variamos parâmetros como raio do domínio, densidade de malha e PML. Estes parâmetros foram alterados até não haver mais mudanças sensíveis nos resultados com alterações subsequentes [Glynne-Jones et al. 2013]. Com isso, obtivemos uma precisão típica menor que 1% para efeitos da ordem de $O(1)$ e $O(\epsilon)$, e inferior à 10% pra efeitos da ordem de $O(\epsilon^3)$ e (ϵ^4) . Tais efeitos de maior ordem, e consequentemente menor intensidade, como o torque associado ao spin acústico e a força devido ao espalhamento, aparentam ter maior sensibilidade às reflexões remanescentes da

Figura 5.1: Esboço da malha utilizada nas simulações numéricas para computação da força e torque de radiação acústicas em uma partícula esférica. O meio é modelado como uma região esférica envolvida por camadas concêntricas definidas como PML. A partícula é posicionada no centro do domínio. A linha tracejada (em azul claro) representa a superfície de integração S_1 . A melhor malha é definida na região delimitada por S_1 , com $1,746 \times 10^6$ elementos finitos. Fora de S_1 a malha é menos densa, compreendendo $2,86 \times 10^5$ elementos. Enquanto a PML é formada por 25860 elementos.



Fonte: [Lima et al. 2020].

PML. Apresentamos os principais parâmetros utilizados nas simulações na Tab. 5.1, os quais proporcionaram a precisão supracitada.

Comparamos os resultados numéricos com a teoria por meio do erro de raiz quadrática média normalizada (NRMSE, do inglês),

$$\Delta(\%) = \frac{100}{x_{max} - x_{min}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n^{teo} - x_n^{num})^2} \quad (5.1)$$

onde N é o número de pontos da amostragem, $x_{max} = \max\{x_n^{teo}\}$ e $x_{min} = \min\{x_n^{teo}\}$. Denotamos o erro para a força e torque de radiação por Δ_{FR} e Δ_{TR} , nessa ordem.

Começaremos a comparação entre os resultados numéricos e analíticos pela componente transversal $F_{x'}^{grad}$, Eq. (3.56), da força de radiação acústica em função da distância

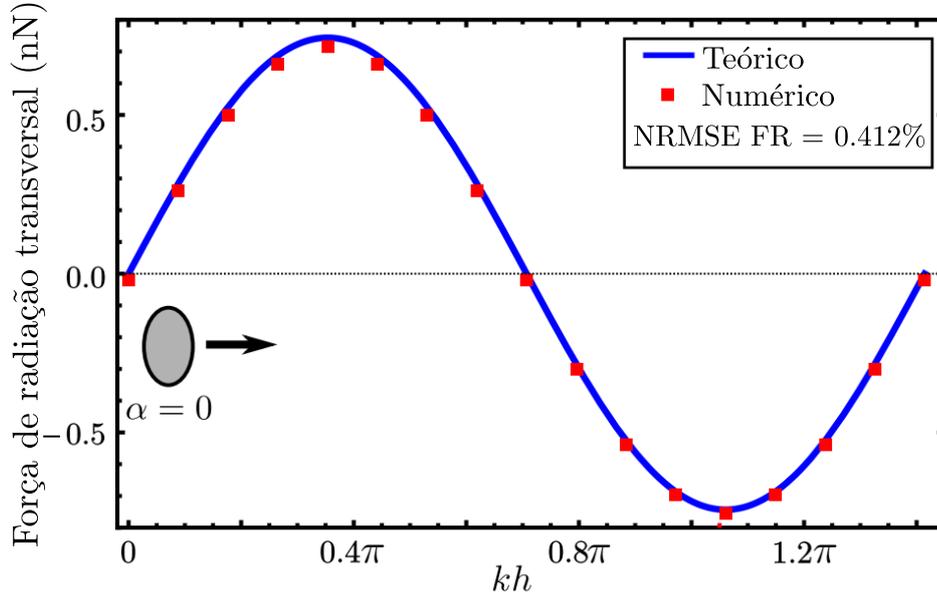
Tabela 5.1: Parâmetros usados nas simulações acústicas de espalhamento para utilização em interação não linear.

Parâmetro	Valor/Especificação
Partícula esferoidal:	
Semieixo maior (a)	47.14 μm
Semieixo menor (b)	30.71 μm
Parâmetro geométrico (ξ_0)	1.3181
Parâmetro de expansão (ϵ)	0.2
Meio (água):	
Densidade (ρ_0)	999.66 kg m^{-3}
Velocidade do som (c_0)	1481 m s^{-1}
Compressibilidade (β_0)	0.456 GPa^{-1}
Raio do domínio	$5a = 235.7 \mu\text{m}$
Raio de S_1	$a + b/4 = 54.82 \mu\text{m}$
Tamanho máximo de elemento dentro de V_1	$b/18 = 1.706 \mu\text{m}$
Tamanho máximo de elemento fora de V_1	$\lambda/48 = 30.71 \mu\text{m}$
Espessura da PML (15 camadas)	$2a = 94.28 \mu\text{m}$
Feixe acústico:	
Amplitude de pressão (p_0)	100 kPa
Densidade de energia acústica (E_0)	2.28 J m^{-3}
Frequência linear (f)	1 MHz
Número de onda (k)	4242.5 m^{-1}
Comprimento de onda (λ_0)	1.481 mm
Informações computacionais:	
CPU	Xeon E5-2690 3.00 GHz
Sistema operacional	Linux
Uso máximo de RAM	$\sim 128 \text{ GB}$
Tempo computacional por conjunto de dados	$\sim 20 \text{ min}$

kh , como apresentada na Fig. 5.2. Adotamos uma partícula (elipse cinza) com parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$, pois este maximiza o valor da diferença de dipolos χ e, conseqüentemente, o torque de radiação dado pela Eq. (3.51). Esse resultado, revela que a partícula ficará presa no nó de pressão $kh = \pi/\sqrt{2} = 0.71\pi$. É perceptível, a excelente concordância entre o resultado teórico e as simulações numéricas em elementos finitos, que é reforçado pelo erro (ver Eq. 5.1) de apenas $\Delta_{FR} = 0.412\%$.

Por outro lado, a força de radiação acústica axial é expressa pela componente devido ao espalhamento $F_{x'}^{grad}$, Eq. (3.58), a qual está apresentada na Fig. (5.3). Neste caso,

Figura 5.2: Resultados numérico e teórico da força de radiação acústica transversal, ($F_{x'}^{grad}$), em uma partícula esferoidal, em função da distância kh . A partícula (elipse cinza) tem parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$ e orientação $\alpha = 0$. Demais parâmetros da simulação, podem ser encontrados resumidos na Tab. 5.1.



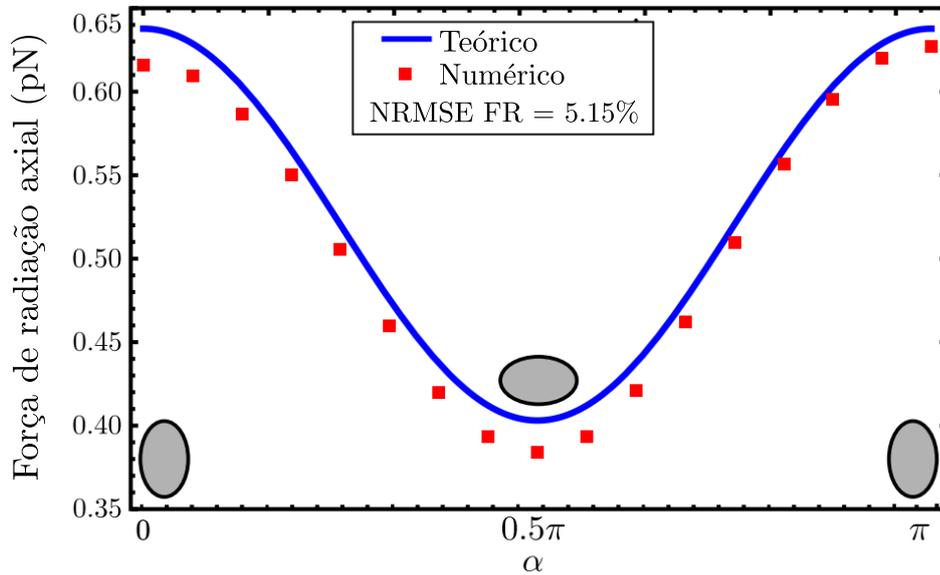
Fonte: [Lima et al. 2020].

o erro é uma ordem de grandeza maior em comparação com a componente transversal, $F_{x'}^{grad}$, como apresentado na Fig. (5.2). Esta menor precisão, se dá pois a intensidade da força devido ao espalhamento que compõe a força axial, é muito menos intensa que sua contraparte transversal que é proporcional à força gradiente, assim a tornando mais sensível aos erros numéricos. De toda forma, é nítido que a força máxima e mínima ocorrem com a partícula com orientação $\alpha = 0, \pi/2$, respectivamente.

O torque de radiação acústica no nó de pressão dado pela Eq. (3.52), está exposto na Fig. 5.4. Onde vemos que, a partícula tem uma orientação preferencial em $\alpha = 0$, isto é, ela ficará alinhada perpendicularmente com a onda estacionária. Mais uma vez, vemos uma notável concordância entre o resultado teórico e numérico, visto que $\Delta_{TR} = 0.57\%$.

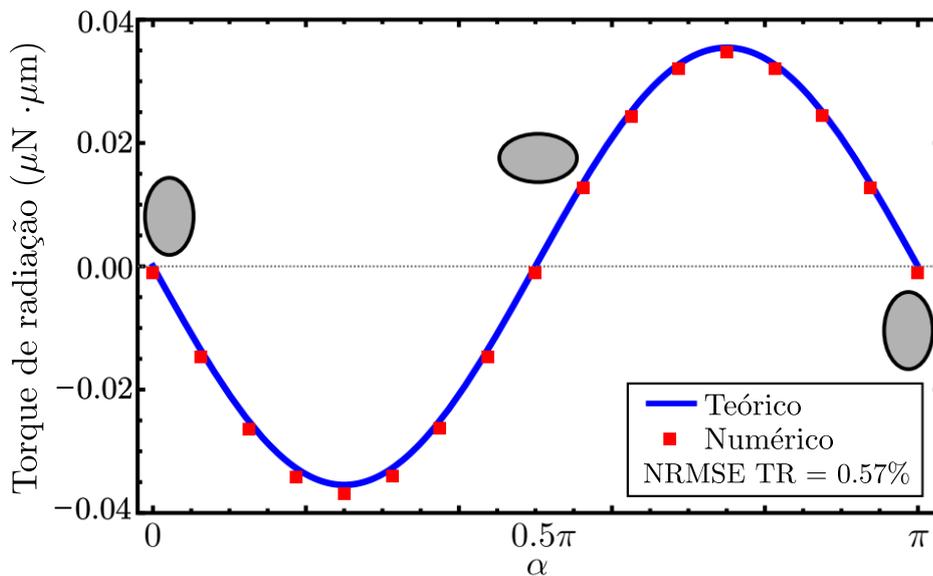
Por sua vez, a intensidade do torque de spin em função da posição da partícula kh é exposto na Fig. 5.5. Para esta análise, fixamos a orientação da partícula em $\alpha = 0$, e utilizamos a Eq. (3.53). Aqui, ainda temos uma boa concordância entre os resultados teórico e numérico, $\Delta_{TR} = 4.51$, embora maior do que o apresentado na Fig. 5.4. Associamos esse erro quase dez vezes maior, ao fato da intensidade do torque devido o spin ter intensidade muito menor em comparação a componente devido o momento exposto na Fig. 5.4, e assim, como a força devido ao espalhamento, ficando mais sensível aos erros numéricos, possivelmente relacionados às reflexões remanescentes e indesejadas da PML.

Figura 5.3: Resultados numérico e teórico da força de radiação acústica axial, (F_z^{sca}), em uma partícula posicionada em um nó de pressão, como função da orientação da partícula. A partícula (elipse cinza) tem parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$. Com demais parâmetros da simulação, resumidos na Tab. 5.1.



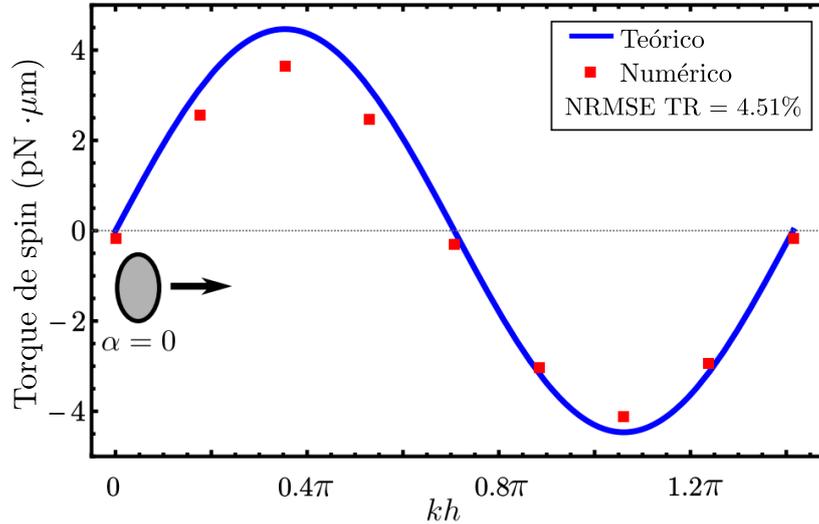
Fonte: [Lima et al. 2020].

Figura 5.4: Resultados numérico e teórico do torque de radiação acústica em uma partícula esferoidal posicionada no nó de pressão, em função da orientação da partícula. A partícula (elipse cinza) tem parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$. Outros parâmetros da simulação, podem ser encontrados resumidos na Tab. 5.1.



Fonte: [Lima et al. 2020].

Figura 5.5: Resultados numérico e teórico da intensidade do torque do spin em uma partícula esferoidal, em função da distância kh . A partícula (elipse cinza) tem parâmetro geométrico $\xi_0 = 1.3181$ e orientação $\alpha = 0$. Mais parâmetros da simulação, podem ser encontrados resumidos na Tab. 5.1.



Fonte: [Lima et al. 2020].

5.2 Transferência de spin acústico para uma partícula esferoidal de subcomprimento de onda

Este modelo numérico faz alusão às configurações experimentais usuais de pinças acústicas de vorticidade e levitação acústica, onde a partícula está inserida em um meio similar a água, e no ar, respectivamente. Apresentamos os parâmetros utilizados para descrever os fluidos citamos na Tabela 5.2. Por sua vez, a partícula esferoidal detém semieixo maior $a = 680 \mu\text{m}$ no ar, e $a = 120 \mu\text{m}$ no água.

Utilizamos o modo de simulação 3D, com elementos finitos tetraédricos, onde computamos o torque de radiação por integração numérica do fluxo de momento angular L , sobre a superfície da partícula como explicitado na Eq. (3.14). O fluido circundante foi representado por um domínio cilíndrico, com diâmetro e e altura de $36b$, onde adotamos a condição de contorno de não espalhamento nas arestas do domínio. A Discretização foi estabelecida a partir das configurações predefinidas para malha extremamente fina, com tamanho máximo de elemento finito definido como $b/50$ na superfície de integração e $\lambda/12$ no meio circundante.

Podemos ver na Fig. 5.6, o torque de radiação acústico, obtido através da Eq. (3.68), para uma partícula esferoidal na água e no ar, em função do parâmetro geométrico ξ_0 . Onde consideramos, uma pressão de pico de $p_0 = 3.5 \text{ kPa}$ no ar, e $p_0 = 0.5 \text{ MPa}$ na água, as frequências de operação foram, $f = 40 \text{ kHz}$ no ar, e $f = 1 \text{ MHz}$ na água, e o ângulo de semicone do feixe foi estabelecido como $\beta = \pi/4$. Seguindo a limite da Eq. (3.29), o

Tabela 5.2: Parâmetros utilizados nas simulações de transferência de spin, em alusão à sistemas acustoflúídicos e de levitação, à temperatura ambiente.

Parâmetro	Valor/Especificação
Ar:	
Densidade (ρ_0)	1.22 kg m ⁻³
Velocidade do som (c_0)	343 m s ⁻¹
Viscosidade dinâmica (μ_0)	1.83×10^{-5} Pa s
Amplitude de pressão (p_0)	3.5 kPa
Frequência linear (f)	40 kHz
Água:	
Densidade (ρ_0)	998 kg m ⁻³
Velocidade do som (c_0)	1483 m s ⁻¹
Viscosidade dinâmica (μ_0)	10^{-3} Pa s
Amplitude de pressão (p_0)	0.5 MPa
Frequência linear (f)	1 MHz
Diâmetro e altura do domínio cilíndrico	$36b$
e_{max} na superfície do esferoide	$b/50$
e_{max} fora da superfície do esferoide	$\lambda/12$

parâmetro de tamanho é sempre menor do que 0.51. O torque máximo foi obtido para $\xi_0 = 1.31$, o que equivale a uma razão de aspecto de $a/b = 1.54$. Os resultados das simulações numéricas apresentaram um erro rms (root-mean-square) da ordem de 10^{-3} , nas duas condições.

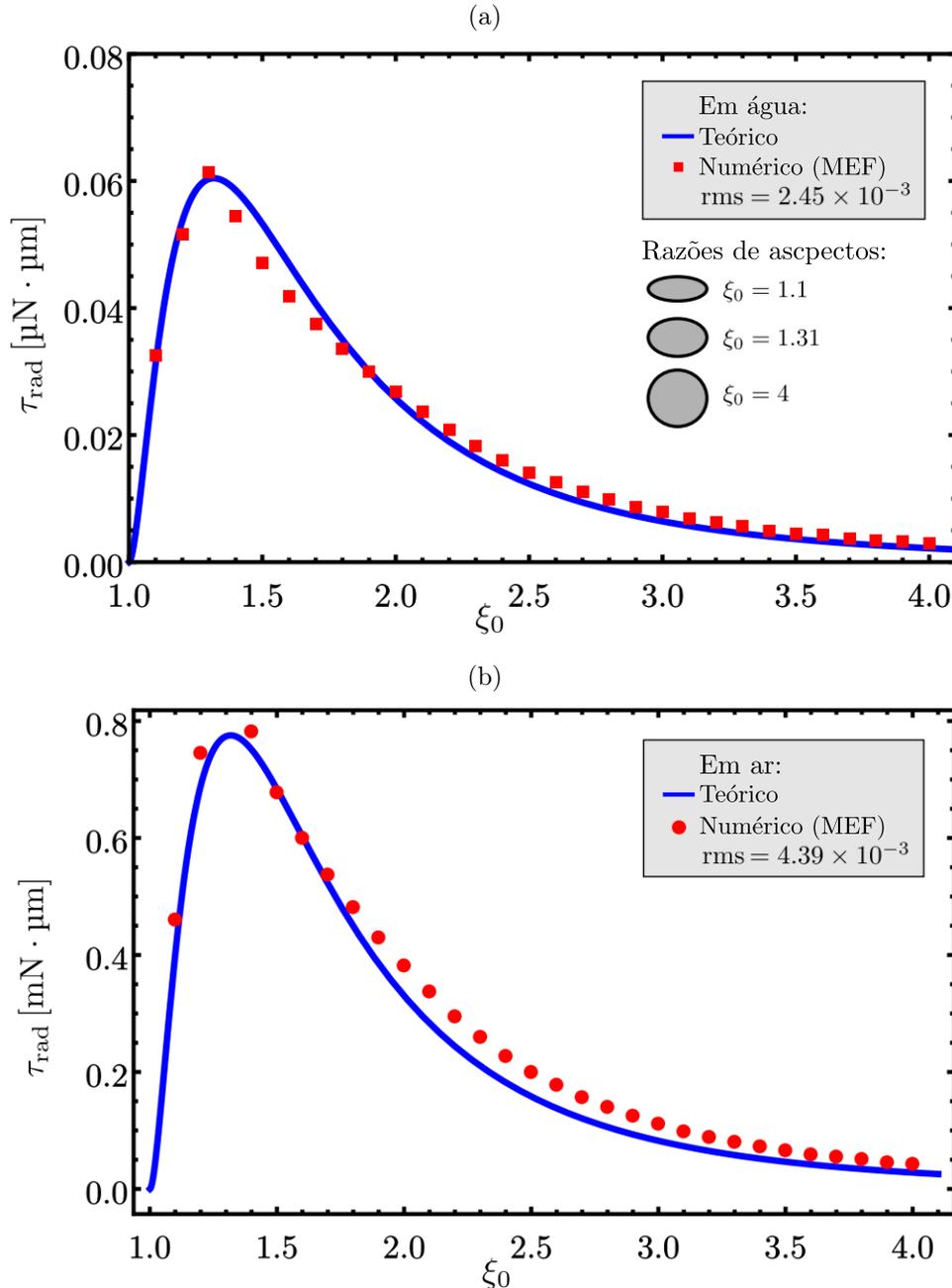
5.3 Campos acústicos médios exercidos em uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda

O modelo numérico utilizado para computar os coeficientes acústicos da Eq. (3.84), por meio do espalhamento de uma onda plana propagante. Com os coeficientes de espalhamento determinados, os mesmos podem ser utilizados em qualquer onda incidente, justificando a utilização inicial das ondas planas. Visto que, além de sua simplicidade, as expressões analíticas dos seus coeficientes de forma do feixe já são conhecidas, os quais são necessários para obtenção dos coeficientes de espalhamento, sendo eles [Colton, Kress e Kress 1998],

$$a_{00} = 2\sqrt{\pi}, \quad a_{10} = 2i\sqrt{3\pi} \cos \beta, \quad a_{11} = -i\sqrt{6\pi} \sin \beta. \quad (5.2)$$

Neste modelo, utilizamos inicialmente o módulo de pressão acústica, e posteriormente

Figura 5.6: Em azul, temos o torque de radiação acústica exercido sobre uma partícula em água (a) e no ar (b), em função do parâmetro geométrico da partícula ξ_0 , dado pela Eq. (3.68) com $\beta = \pi/4$. Os parâmetros pra a configuração na água são $a = 120 \mu\text{m}$, $f = 1 \text{ MHz}$ e $p_0 = 500 \text{ kPa}$; e no ar, $a = 680 \mu\text{m}$, $f = 40 \text{ kHz}$ e $p_0 = 3.5 \text{ kPa}$. Em vermelho, temos os resultados das simulações numéricas em elementos finitos. O valor do torque de radiação máximo foi obtido para $\xi_0 = 1.31$ ($a/b = 1.54$). Também apresentamos alguns exemplos de partículas com proporções diferentes ($\xi_0 = 1.1, 1.31, 4$) na figura (a).



Fonte: [Lopes et al. 2020].

o de mecânica dos sólidos, onde resolvemos as equações da acústica linear e de elasto-dinâmica, respectivamente. Além disso, adotamos o referencial da partícula, de modo

que, a amplitude de pressão incidente dada por $p_{in} = p_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_p}$, com o vetor de onda $\mathbf{k} = k(\sin\beta\mathbf{e}_{x_p} + \cos\beta\mathbf{e}_{z_p})$, foi definida como pressão de fundo no domínio computacional. Para representar uma partícula rígida temos que estabelecer uma condição de contorno, onde a componente normal da velocidade deve se anular na superfície S_0 da partícula,

$$(\mathbf{v}_{in,p} + \mathbf{v}_{sc,p})|_{r_p \in S_0} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (5.3)$$

com $\mathbf{v}_{sc,p}$ sendo a velocidade do fluido espalhado e \mathbf{n} é o vetor normal para fora da partícula. Por outro lado, para uma partícula sólida elástica, as condições de contorno ao longo da superfície da partícula são de continuidade para a tensão normal e o deslocamento, e condição de anulação para a tensão tangencial. Deste modo, dispomos de

$$(p_{in} + p_{sc} - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_p)|_{r_p \in S_0} = 0, \quad (5.4a)$$

$$\mathbf{n} \cdot \left[\frac{i}{\omega} (\mathbf{v}_{in,p} + \mathbf{v}_{sc,p}) - \mathbf{u}_p \right]_{r_p \in S_0} = 0, \quad (5.4b)$$

$$\mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\sigma}_p|_{r_p \in S_0} = 0. \quad (5.4c)$$

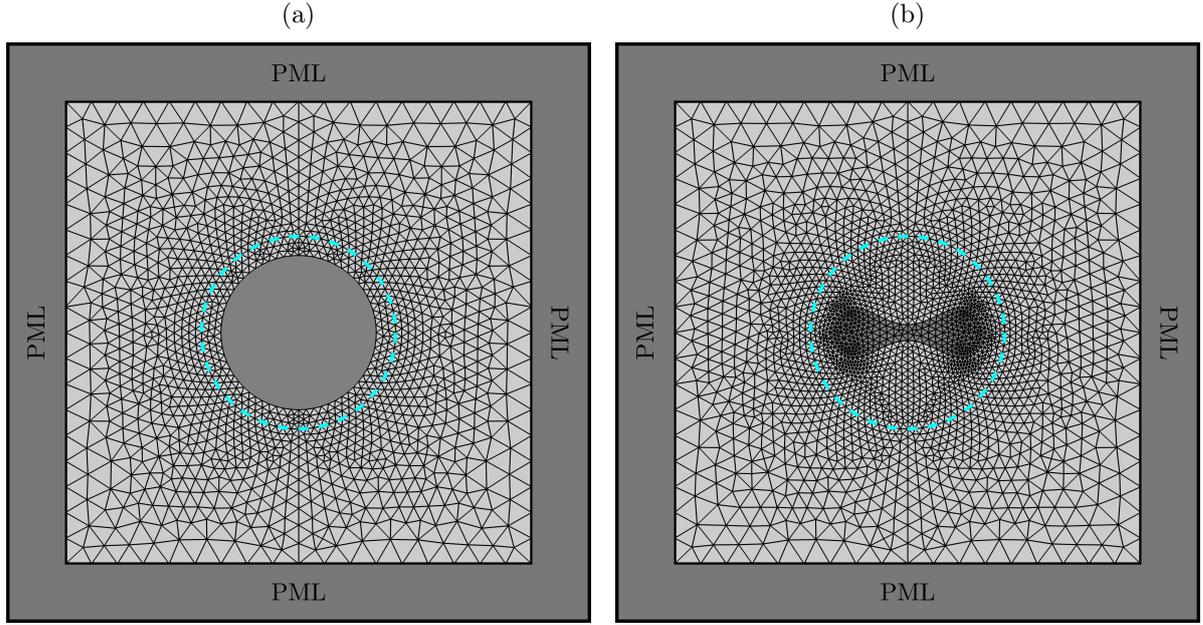
com \mathbf{t} sendo o vetor unitário tangencial, \mathbf{u}_p o vetor de deslocamento, e $\boldsymbol{\sigma}_p$ o tensor de tensões da partícula.

Representamos o domínio fluídico através de uma região cilíndrica. Nas extremidades do fluido foi estabelecida uma região de perfectly matched layer (PML), formando uma casca cilíndrica de um quarto de comprimento de onda de espessura, e concêntrica com o domínio do fluido, a qual é responsável por absorver as ondas espalhadas pela partícula, minimizando a interferência nos resultados devido à reflexões. Adotamos a utilização de um modelo com axissimetria 2D, para minimizar os custos computacionais, uma vez que o modelo 3D completo, demanda de uma quantidade de memória RAM, para a maioria das simulações, que ultrapassam o que há disponível em computadores convencionais (< 16 GB). Com o modelo axissimétrico 2D usual, podemos simular ondas incidindo na partícula por meio do eixo de simetria ($\beta = 0$), o que nos permite calcular os coeficientes de monopolo (s_{00}) e dipolo axial (s_{10}). No entanto, não podemos obter o coeficiente de dipolo transversal dessa maneira convencional, visto que, para $\beta = 0$ na Eq. (5.2) temos $a_{11} = 0$, resultando em uma indeterminação na Eq. (3.82). Então aplicamos um método de expansão de ondas planas [COMSOL 2021], que faz a relação entre ondas planas e cilíndricas, nos permitindo representar o espalhamento do objeto axissimétrico com uma incidência de onda transversal. Com isso, utilizando cinco termos da expansão da onda plana computamos o coeficiente de dipolo transversal s_{11} , com $\beta = \pi/2$. Resolvemos o espalhamento para uma partícula esférica rígida e para um glóbulo vermelho (RBC) (ver Fig. 5.7), os parâmetros utilizados nas simulações numéricas estão detalhados na Tab. 5.3.

Tabela 5.3: Parâmetros físicos e geométricos usados nas simulações para obtenção dos coeficientes de espalhamento para utilização em campos médios.

Parâmetro	Valor/Especificação
Domínio computacional (cilíndrico):	
Diâmetro e altura	100a
Raio da superfície de integração (R)	5a/4
Tamanho mínimo de elemento	a/200
Tamanho máximo de elemento	a/10 até a/3
Taxa de crescimento de malha	10%
Tipo de PML	Polinomial
Fator de escala da PML	1
Parâmetro de curvatura da PML	2
Comprimento da PML	50a
Camadas de PML	30-50
Frequência	2-12 MHz
Meio fluido (água):	
Densidade (ρ_0)	998 kg m ⁻³
Compressibilidade (β_0)	0.456 GPa ⁻¹
Meio fluido (plasma sanguíneo):	
Densidade (ρ_0)	1026 kg m ⁻³
Compressibilidade (β_0)	0.4077 GPa ⁻¹
Partícula (esfera rígida):	
Raio (a)	3.91 μ m
Partícula (RBC):	
Densidade (ρ_p)	1100 kg m ⁻³
Módulo de Young	26 kPa
Compressibilidade (β_0)	0.34 GPa ⁻¹
Semieixo maior (a)	$R_0 = 3.91 \mu$ m
Semieixo menor (b)	$C_0/2 = 0.405 \mu$ m
Constante C_2	7.83 μ m
Constante C_4	-4.39 μ m
Informações computacionais:	
CPU	Xeon E5-2690 3.00 GHz
Sistema operacional	Linux
Uso máximo de RAM	<16 GB
Tempo computacional 2D convencional	1min
Tempo computacional 2D com expansão	5min

Figura 5.7: Esboço da malha axissimétrica 2D utilizada nas simulações do espalhamento de uma onda plana por uma partícula esférica rígida (a) em água, e uma RBC (b) modelada como um sólido elástico, no plasma sanguíneo. A densidade de malha mostrada é apenas para fins ilustrativos. As partículas estão destacadas em cinza e têm o mesmo diâmetro máximo $2a = 7.82 \mu\text{m}$. A superfície de integração, onde são calculados os coeficientes de espalhamento, está representada pelo círculo ciano pontilhado. O meio é modelado como uma região cilíndrica envolvida por camadas concêntricas definidas como PML.



Fonte: autor, 2023.

Modelamos a RBC como um material sólido elástico com geometria em forma de disco bicôncavo descrito em coordenadas cilíndricas (ϱ, φ, z) pela equação [Evans e Fung 1972]

$$z^2 = \frac{1}{4} \left[1 - \left(\frac{\varrho}{R_0} \right)^2 \right] \left[C_0 + C_2 \left(\frac{\varrho}{R_0} \right)^2 + C_4 \left(\frac{\varrho}{R_0} \right)^4 \right]^2 \quad (5.5)$$

com $2R_0$ e C_0 , sendo o diâmetro transversal e a espessura central, nessa ordem, e os parâmetros geométricos C_2 e C_4 estão expostos na Tab. 5.3.

Aqui definimos o parâmetro de convergência da malha como

$$Conv. \equiv \max \left\{ \frac{|\text{Re}[s_{nm}^{ref}] - \text{Re}[s_{nm}]|}{|\text{Re}[s_{nm}^{ref}]|}, \frac{|\text{Im}[s_{nm}^{ref}] - \text{Im}[s_{nm}]|}{|\text{Im}[s_{nm}^{ref}]|} \right\}. \quad (5.6)$$

Onde as soluções de referência para a partícula esférica é dada por meio da solução exata

dos coeficientes dados por

$$s_{00} = -\frac{j'_0(ka)}{h'_0(ka)}, \quad s_{10} = s_{11} = -\frac{j'_1(ka)}{h'_1(ka)}, \quad (5.7)$$

com j_n sendo a função esférica de Bessel de ordem n , e aqui o símbolo de linha “ ’ ” representa a diferenciação. Por sua vez, para a RBC adotamos s_{nm}^{ref} como sendo as soluções que não demonstram alterações relevantes após refinamentos de malha subsequentes. Computamos as simulações do modelo de elementos finitos em uma estação de trabalho SUPERMICRO, contendo dois processadores Xeon E5-2690v2 @ 3 GHz e 224 GB de RAM. As simulações em 2D convencional, levaram cerca de 1 min para computar os coeficientes, e cerca de 5 min com o método de expansão de onda plana.

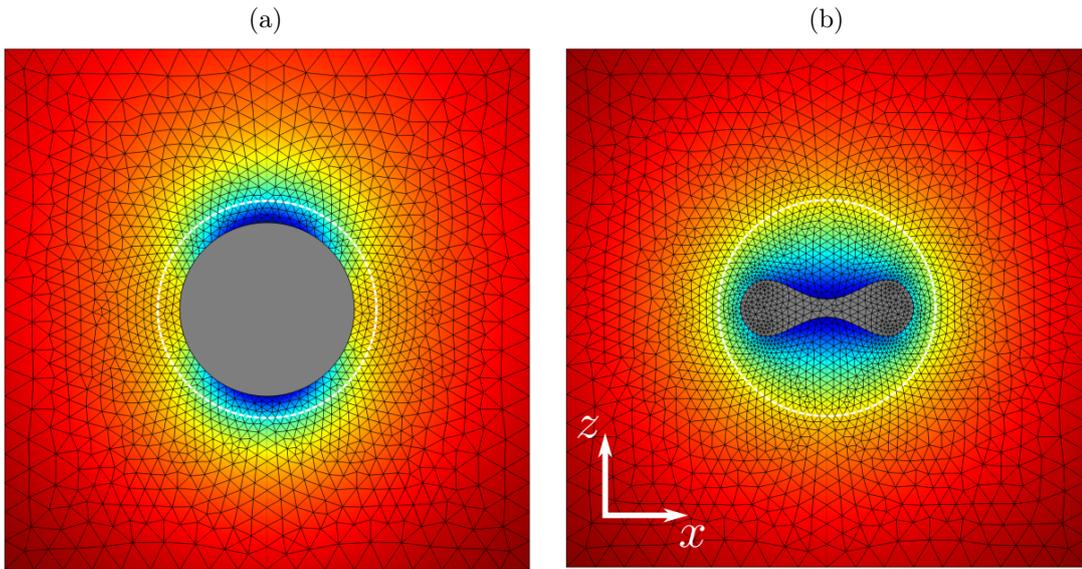
Apresentamos uma demonstração da pressão espalhada devido uma onda plana incidindo axialmente (eixo z) na Fig. 5.8a. Na imagem de fundo a região azul-ciano representa a pressão negativa, e a região amarelo-vermelho é a pressão positiva. A malha apresentada tem apenas finalidade ilustrativa. Ambas as partículas, a esférica e a RBC, têm o mesmo diâmetro máximo $2a = 7.82 \mu\text{m}$. Os coeficientes de espalhamento são computados na superfície de integração, denotada pelo círculo branco pontilhado que envolve a partícula.

Os coeficientes de espalhamento para uma pequena esfera rígida imersa em água para uma faixa de frequência usual da acustofluídica, 2-12 MHz, estão apresentados na Fig. 5.9. Onde confirmamos a degenerescência dos coeficientes de dipolo axial e transversal $s_{10} = s_{11}$, dentro dos valores de erro numérico. Observamos uma excelente concordância dos resultados numéricos com a solução exata, principalmente para frequências mais altas, visto que em 2 MHz o parâmetro de convergência (ver Eq. 5.6) é de $Conv. = 7\%$, com tamanho máximo de elemento finito igual a $a/3$, diminuindo para $Conv. = 1\%$ em 3 MHz, e continua caindo conforme a frequência aumenta. Tivemos problemas de convergência para frequências menores que 1 MHz, principalmente na parte real do coeficiente de espalhamento, visto que a sua solução exata usada como referência é da ordem de $O[(ka)^6]$ [Leão-Neto e Silva 2016], seu valor cai expressivamente ao diminuirmos a frequência, o que pode tornar o coeficiente mais sensível a erros numéricos, causando instabilidade de convergência em frequências menores.

Os coeficientes de espalhamento de uma RBC em plasma sanguíneo estão expostos na Fig. 5.10. Neste caso, obtivemos um parâmetro de convergência de malha de $Conv. < 9\%$, para um tamanho de elemento finito máximo de $a/10$. Novamente, obtemos um resultado mais preciso conforme aumentamos a frequência. Através destes coeficientes calculados, por meio do espalhamento de uma onda plana propagante, podemos obter a força e torque de radiação gerados em qualquer onda, a título de exemplo, uma onda plana estacionária.

Deste modo, os fatores giroacústico e acustoforético computados para uma RBC em plasma sanguíneo, estão expostos na Fig. 5.11. Utilizamos os dados obtidos em interpolações polinomiais lineares da frequência (f). Analisando primeiramente o fato giroacústico,

Figura 5.8: Representação do modelo numérico 2D axissimétrico utilizadas para calcular o espalhamento de uma onda plana por uma partícula esférica rígida (a) em água, e uma RBC (b) modelada como um sólido elástico, no plasma sanguíneo. A densidade de malha mostrada é apenas para fins ilustrativos. As partículas estão destacadas em cinza e têm o mesmo diâmetro máximo $2a = 7.82 \mu\text{m}$. A superfície de integração, onde são calculados os coeficientes de espalhamento, está representada pelo círculo branco pontilhado. Demonstramos a parte real da pressão espalhada através da imagem de fundo, sendo as regiões em azul a pressão negativa e as regiões em amarelo-vermelho a pressão positiva.



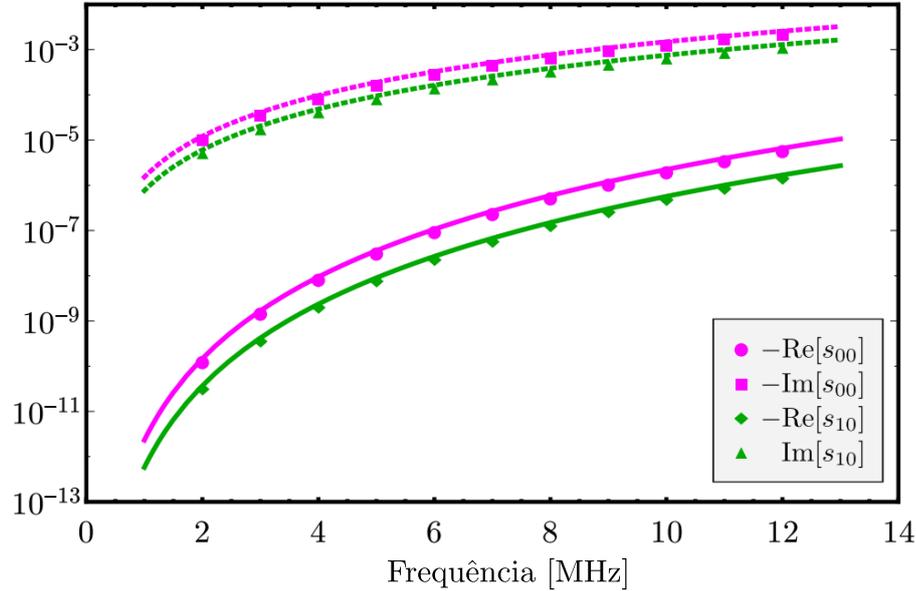
Fonte: [Lima e Silva 2021].

Eq. (3.105), temos

$$\gamma_{\perp}^i = -0.001433 - (0.000174 \text{ MHz}^{-1})f, \quad (5.8)$$

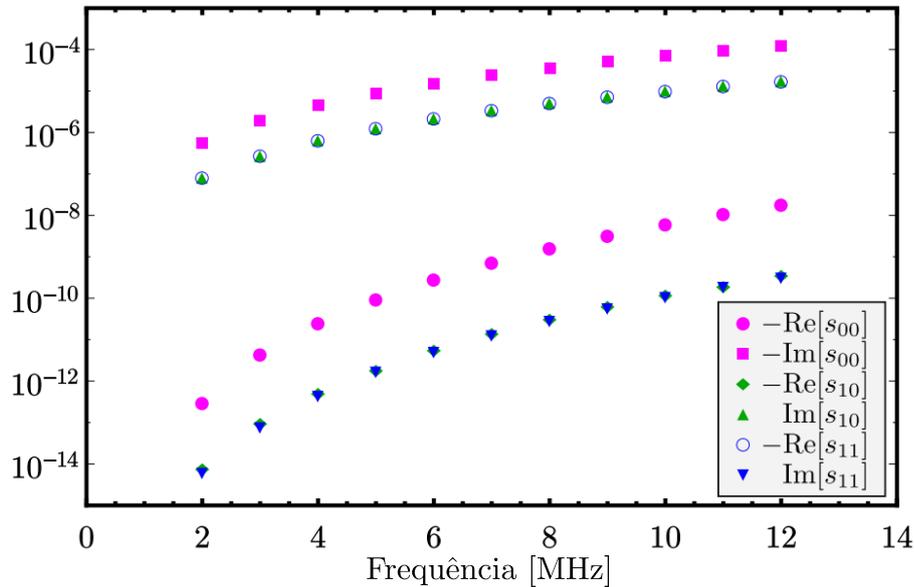
onde utilizamos o volume da RBC [Evans e Fung 1972] $V = 94 \mu\text{m}^3$, e a frequência f deve ser imputada em megahertz. O erro da raiz quadrática média normalizada (NRMSE, do inglês) entre os dados e a interpolação polinomial é NRMSE=5%, onde foi normalizado pelo intervalo de dados. Dessa forma, tomando um valor típico de densidade de energia em acústica, tal como $E_0 = 10 \text{ J m}^{-3}$, o torque de radiação de pico é $1.62 \text{ pN } \mu\text{m}$. Uma vez que temos γ_{\perp}^i negativo, o torque de radiação alinha a RBC (seu eixo de simetria) com a direção axial ($\beta = 0$), sendo que esta previsão já foi verificada experimentalmente em um dispositivo acustofluídico de meio comprimento de onda [Jakobsson, Antfolk e Laurell 2014]. Caso o segundo ângulo de orientação seja $\alpha = 0$, o torque segue sendo $\tau^{rad} \sim -e_y$, ou seja, como o sistema de laboratório segue a regra da mão direita, a RBC gira em torno de seu diâmetro transversal (eixo y) no sentido horário. No entanto, caso $\alpha = \pi/2$ temos $\tau^{rad} \sim e_x$, logo a RBC gira em torno do seu diâmetro transversal (eixo x), no sentido anti-horário.

Figura 5.9: Coeficientes de espalhamento de uma esfera rígida muito menor que o comprimento de onda, em função da frequência. As soluções exatas para os coeficientes, Eq. (5.7), estão representadas pelas linhas contínuas e tracejadas.



Fonte: [Lima e Silva 2021].

Figura 5.10: Coeficientes de espalhamento obtidos para uma RBC no plasma sanguíneo, em função da frequência.



Fonte: [Lima e Silva 2021].

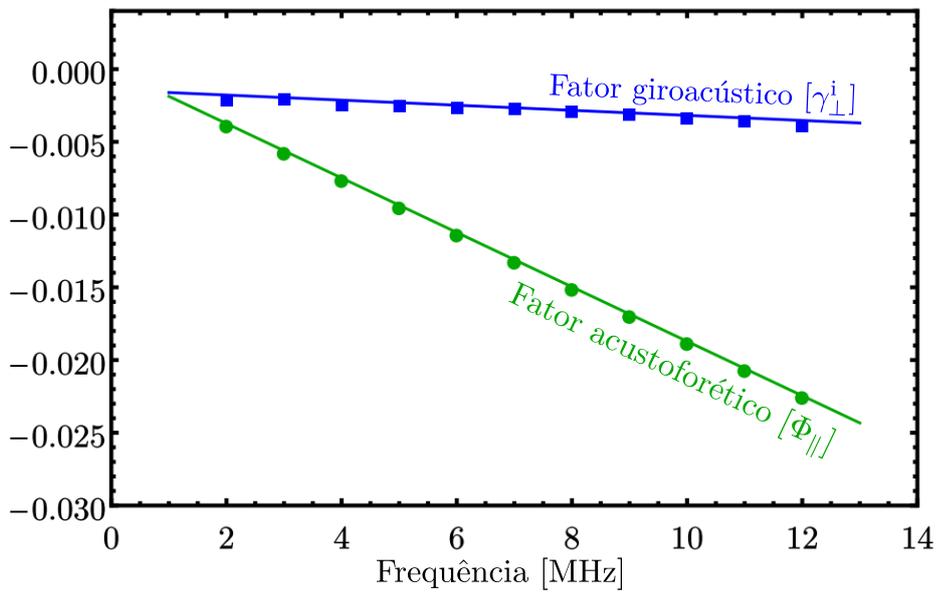
Definido a orientação da RBC, obtemos a força de radiação na onda estacionária pela Eq. (3.95). Onde definimos o fator acustoforético, através de uma interpolação linear,

como

$$\Phi_{\parallel} = -(0.001871 \text{ MHz}^{-1})f, \quad (5.9)$$

onde utilizamos a área de seção transversal $A_{\text{perp}} = \pi R_0^2$, e a frequência deve ser imputada em megahertz. Neste caso, o erro entre os dados e a interpolação é apenas NRMSE=0.1%. Adotando uma densidade de energia de $E_0 = 10 \text{ J m}^{-3}$ e frequência $f = 2 \text{ MHz}$, temos um pico de força de radiação de 1.79 pN. Ademais, como $\Phi_{\parallel} < 0$, deduzimos que a RBC ficará presa em um nó de pressão, $kz_0 = (2n + 1)\pi/2$, com $n \in \mathbb{Z}$, o que também já foi verificado experimentalmente [Jakobsson, Antfolk e Laurell 2014].

Figura 5.11: Fatores giroacústico e acustoforético de uma RBC no plasma sanguíneo, em função da frequência. As linhas contínuas azul e verde, denotam interpolações lineares dos dados.



Fonte: [Lima e Silva 2021].

Comparando nossos resultados com os resultados obtidos por aproximação de Born [Jerome et al. 2019] para uma RBC, com $f = 2 \text{ MHz}$, e demais condições elencadas na Tab. 5.3. Temos, para a força de radiação acústica um desvio relativo entre os resultados de apenas 0.4%. Infelizmente, para o torque de radiação acústica, não temos como fazer a mesma comparação, pois a referência dispõe apenas do torque em um antinó de pressão, por exemplo, em $kd = 0$, na notação do artigo. Por nosso método, o torque nessa posição seria nulo. Na Ref. [Jerome et al. 2019], o pico do torque no antinó é $\sim 10^{-5} \tau_0$. Comparando com o nosso resultado em um nó de pressão, temos um valor duas ordens de grandeza maior, o que pode justificar nossa previsão de torque nulo em um antinó de pressão.

6

Conclusões e perspectivas

Apresentamos a força e o torque de radiação acústica resultantes da interação não linear de uma onda acústica arbitrária e uma partícula esferoidal rígida de subcomprimento de onda. Descrevemos como as simulações numéricas em elementos finitos foram desenvolvidas, bem como as expressões analíticas que foram obtidas. Comparamos os resultados analíticos e numéricos, ao analisamos a força e o torque de radiação acústica da partícula esferoidal em um feixe composto por duas ondas planas propagantes com vetores de onda cruzados formando um ângulo reto, onde pudemos analisar as componentes de gradiente e de espalhamento da força, bem como as componentes do torque devido ao momento e ao spin, em todos os casos com uma concordância satisfatória entre os resultados.

Posteriormente, adotamos um feixe de Bessel de primeira ordem como onda incidente, através do qual foi isolado o termo de spin na expressão do torque para uma partícula esferoidal de subcomprimento de onda. Tomando esta partícula centrada no eixo do feixe, o torque de radiação foi computado, bem como expomos a relação entre o spin e velocidade angular, dessa forma foi previsto que a partícula adquira uma velocidade angular girando em torno do seu eixo menor. Ressaltamos novamente, a boa concordância entre o resultado analítico e o torque de radiação obtido pela integral numérica da densidade de momento angular.

Também foi apresentado, um método semi-analítico para obtenção dos campos acústicos médios de força e torque de radiação, exercidos em uma partícula axissimétrica de subcomprimento de onda na presença de uma onda acústica qualquer. As expressões analíticas para os campos médios, foram derivados em função dos coeficientes de espalhamento de monopolo e dipolo, por meio da expansão em ondas parciais. De modo que tais coeficientes dependem apenas das propriedades da partícula e do fluido, logo, uma vez determinados em uma dada configuração, podem ser utilizados para qualquer onda acústica, inclusive em ondas estruturadas de dispositivos microfluídicos. Detalhamos como obter esses coeficientes de maneira bastante eficiente, através de simulações numéricas, via método de elementos finitos. Realizamos testes de verificação do método apresentado, em uma pequena esfera rígida em água, nos quais obtivemos surpreendente precisão

em comparação com os resultados exatos, além de testes mais realistas com um glóbulo vermelho em plasma sanguíneo, que também corroboraram com previsões experimentais existentes.

Além dos resultados aqui apresentados, também colaboramos com simulações numéricas em trabalhos de imageamento de ultrassom de alta resolução [Lima et al. 2020], [Leao-Neto et al. 2021], e no desenvolvimento de um dispositivo acustofluídico impresso em 3D [Santos et al. 2021] (ver apêndice B). Dessa forma, temos como perspectivas para trabalhos futuros com simulações numéricas, a inclusão dos efeitos de viscosidade nos trabalhos de força e torque de radiação acústica, o desenvolvimento de novos métodos de imageamento de ultrassom de alta resolução com lentes acústicas em formatos não esféricos, e o desenvolvimento de dispositivos acustofluídicos com vorticidade, para computação da força e torque de radiação acústica em partículas axissimétricas nestes dispositivos.

Diante dos resultados expostos, acreditamos que a relevância das simulações numéricas realizadas nos trabalhos apresentados foi comprovada, bem como salientamos que nossos resultados podem colaborar com novas investigações com células e outros microrganismos alongados em dispositivos acustofluídicos.

Referências Bibliográficas

- [Ai, Sanders e Marrone 2013]AI, Y.; SANDERS, C. K.; MARRONE, B. L. Separation of escherichia coli bacteria from peripheral blood mononuclear cells using standing surface acoustic waves. *Analytical chemistry*, ACS Publications, v. 85, n. 19, p. 9126–9134, 2013.
- [Andrade 2014]ANDRADE, J. H. A. L. *Acoustic radiation force and torque on suspended objects in an inviscid fluid*. 74 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Alagoas - Ufal, Maceió, Brazil, 2014.
- [Ayres e Gaunaurd 1987]AYRES, V.; GAUNAURD, G. Acoustic resonance scattering by viscoelastic objects. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 81, n. 2, p. 301–311, 1987.
- [Baudoin et al. 2019]BAUDOIN, M. et al. Folding a focalized acoustical vortex on a flat holographic transducer: Miniaturized selective acoustical tweezers. *Science advances*, American Association for the Advancement of Science, v. 5, n. 4, p. eaav1967, 2019.
- [Baudoin e Thomas 2020]BAUDOIN, M.; THOMAS, J.-L. Acoustic tweezers for particle and fluid micromanipulation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Reviews, v. 52, p. 205–234, 2020.
- [Bedford e Drumheller 1994]BEDFORD, A.; DRUMHELLER, D. Elastic wave propagation. *John Wiley & Sons*, p. 151–165, 1994.
- [Berenger 1994]BERENGER, J.-P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 114, n. 2, p. 185–200, 1994.
- [Bliokh e Nori 2019]BLIOKH, K. Y.; NORI, F. Spin and orbital angular momenta of acoustic beams. *Physical Review B*, APS, v. 99, n. 17, p. 174310, 2019.
- [Bruus 2012]BRUUS, H. Acoustofluidics 7: The acoustic radiation force on small particles. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 12, n. 6, p. 1014–1021, 2012.
- [Collins et al. 2015]COLLINS, D. J. et al. Two-dimensional single-cell patterning with one cell per well driven by surface acoustic waves. *Nature communications*, Nature Publishing Group UK London, v. 6, n. 1, p. 8686, 2015.

[Colton, Kress e Kress 1998]COLTON, D. L.; KRESS, R.; KRESS, R. *Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory*. [S.l.]: Springer, 1998. v. 93.

[COMSOL 2014]COMSOL. *A Brief Introduction to the Weak Form*. 2014. Disponível em: <<https://br.comsol.com/blogs/brief-introduction-weak-form/>>. Acesso em: 05 fev. 2019.

[COMSOL 2015]COMSOL. *Discretizing the Weak Form Equations*. 2015. Disponível em: <<https://br.comsol.com/blogs/discretizing-the-weak-form-equations/>>. Acesso em: 12 fev. 2019.

[COMSOL 2015]COMSOL. *Using Perfectly Matched Layers and Scattering Boundary Conditions for Wave Electromagnetics Problems*. 2015. Disponível em: <<https://br.comsol.com/blogs/using-perfectly-matched-layers-and-scattering-boundary-conditions-for-wave-electromagnetics-problems/>>. Acesso em: 12 fev. 2019.

[COMSOL 2016]COMSOL. *Finite Element Mesh Refinement*. 2016. Disponível em: <<https://br.comsol.com/multiphysics/mesh-refinement>>. Acesso em: 16 fev. 2019.

[COMSOL 2016]COMSOL. *The Finite Element Method (FEM)*. 2016. Disponível em: <<https://br.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>>. Acesso em: 05 fev. 2019.

[COMSOL 2019]COMSOL. *Introduction to Perfectly Matched Layers*. 2019. Disponível em: <https://doc.comsol.com/5.5/doc/com.comsol.help.aco/aco Ug_pressure.05.147.html#1552989>. Acesso em: 12 fev. 2019.

[COMSOL 2019]COMSOL. *PML Implementation*. 2019. Disponível em: <https://doc.comsol.com/5.5/doc/com.comsol.help.comsol/comsol_ref_definitions.12.111.html#1715348>. Acesso em: 12 fev. 2019.

[COMSOL 2021]COMSOL. *Plane Wave Scattering off a 2D Axisymmetric Object: Plane Wave Expansion Approach*. 2021. Disponível em: <<https://www.comsol.com/model/plane-wave-scattering-off-a-2d-axisymmetric-object-plane-wave-expansion-approach-51311>>.

[Doinikov 1994]DOINIKOV, A. Acoustic radiation pressure on a rigid sphere in a viscous fluid. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 447, n. 1931, p. 447–466, 1994.

[Evans e Fung 1972]EVANS, E.; FUNG, Y.-C. Improved measurements of the erythrocyte geometry. *Microvascular research*, Elsevier, v. 4, n. 4, p. 335–347, 1972.

-
- [Fan et al. 2008]FAN, Z. et al. Acoustic radiation torque on an irregularly shaped scatterer in an arbitrary sound field. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 124, n. 5, p. 2727–2732, 2008.
- [Foresti e Poulikakos 2014]FORESTI, D.; POULIKAKOS, D. Acoustophoretic contactless elevation, orbital transport and spinning of matter in air. *Physical review letters*, APS, v. 112, n. 2, p. 024301, 2014.
- [Garbin et al. 2015]GARBIN, A. et al. Acoustophoresis of disk-shaped microparticles: A numerical and experimental study of acoustic radiation forces and torques. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 138, n. 5, p. 2759–2769, 2015.
- [Glynne-Jones et al. 2013]GLYNNE-JONES, P. et al. Efficient finite element modeling of radiation forces on elastic particles of arbitrary size and geometry. *The Journal of the Acoustical Society of America*, ASA, v. 133, n. 4, p. 1885–1893, 2013.
- [Gong, Marston e Li 2019]GONG, Z.; MARSTON, P. L.; LI, W. T-matrix evaluation of three-dimensional acoustic radiation forces on nonspherical objects in bessel beams with arbitrary order and location. *Physical Review E*, APS, v. 99, n. 6, p. 063004, 2019.
- [Gor’kov 1962]GOR’KOV, L. P. On the forces acting on a small particle in an acoustical field in an ideal fluid. In: *Sov. Phys. Dokl.* [S.l.: s.n.], 1962. v. 6, p. 773–775.
- [GRAFF 1975]GRAFF, K. W. M. I. E. Solids. *Mineola, NY USA: Dover*, 1975.
- [Gray e Nickel 1978]GRAY, C.; NICKEL, B. Debye potential representation of vector fields. *American Journal of Physics*, American Association of Physics Teachers, v. 46, n. 7, p. 735–736, 1978.
- [Hahn et al. 2015]HAHN, P. et al. Numerical simulation of acoustofluidic manipulation by radiation forces and acoustic streaming for complex particles. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 15, n. 22, p. 4302–4313, 2015.
- [Hastings, Schneider e Broschat 1996]HASTINGS, F. D.; SCHNEIDER, J. B.; BROSCHEAT, S. L. Application of the perfectly matched layer (pml) absorbing boundary condition to elastic wave propagation. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 100, n. 5, p. 3061–3069, 1996.
- [Hong et al. 2017]HONG, Z. et al. Dynamics of levitated objects in acoustic vortex fields. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 7, n. 1, p. 7093, 2017.
- [Jakobsson, Antfolk e Laurell 2014]JAKOBSSON, O.; ANTFOLK, M.; LAURELL, T. Continuous flow two-dimensional acoustic orientation of nonspherical cells. *Analytical chemistry*, ACS Publications, v. 86, n. 12, p. 6111–6114, 2014.

-
- [Jerome et al. 2019]JEROME, T. S. et al. Born approximation of acoustic radiation force and torque on soft objects of arbitrary shape. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 145, n. 1, p. 36–44, 2019.
- [Johnson 2021]JOHNSON, S. G. Notes on perfectly matched layers (pmls). *arXiv preprint arXiv:2108.05348*, 2021.
- [Karlsen e Bruus 2015]KARLSEN, J. T.; BRUUS, H. Forces acting on a small particle in an acoustical field in a thermoviscous fluid. *Physical Review E*, APS, v. 92, n. 4, p. 043010, 2015.
- [Keller 1957]KELLER, J. B. Acoustic torques and forces on disks. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 29, n. 10, p. 1085–1090, 1957.
- [King 1934]KING, L. V. On the acoustic radiation pressure on spheres. In: THE ROYAL SOCIETY. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. Longon, UK, 1934. v. 147, n. 861, p. 212–240.
- [Kong et al. 2014]KONG, D. et al. Swimming motion of rod-shaped magnetotactic bacteria: the effects of shape and growing magnetic moment. *Frontiers in Microbiology*, Frontiers, v. 5, p. 8, 2014.
- [Kotakl 1933]KOTAKL, M. An acoustical problem relating to the theory of bayleigh disc. *Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 3rd Series*, THE PHYSICAL SOCIETY OF JAPAN, The Mathematical Society of Japan, v. 15, n. 1, p. 30–57, 1933.
- [Leão-Neto e Silva 2016]LEÃO-NETO, J.; SILVA, G. T. Acoustic radiation force and torque exerted on a small viscoelastic particle in an ideal fluid. *Ultrasonics*, Elsevier, v. 71, p. 1–11, 2016.
- [Leao-Neto et al. 2021]LEAO-NETO, J. P. et al. Development and characterization of a superresolution ultrasonic transducer. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, IEEE, v. 69, n. 2, p. 779–786, 2021.
- [Leão-Neto, Lopes e Silva 2020]LEÃO-NETO, J. P.; LOPES, J. H.; SILVA, G. T. Acoustic radiation torque exerted on a subwavelength spheroidal particle by a traveling and standing plane wave. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 147, n. 4, p. 2177–2183, 2020.
- [Lee e Wang 1989]LEE, C. P.; WANG, T. G. Near-boundary streaming around a small sphere due to two orthogonal standing waves. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 85, n. 3, p. 1081–1088, 1989.

-
- [Li et al. 2015]LI, P. et al. Acoustic separation of circulating tumor cells. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 112, n. 16, p. 4970–4975, 2015.
- [Lima et al. 2020]LIMA, E. B. et al. Nonlinear interaction of acoustic waves with a spheroidal particle: Radiation force and torque effects. *Physical Review Applied*, APS, v. 13, n. 6, p. 064048, 2020.
- [Lima et al. 2020]LIMA, E. B. et al. An image formation model for ultrasound superresolution using a polymer ball lens. *Applied Acoustics*, Elsevier, v. 170, p. 107494, 2020.
- [Lima e Silva 2021]LIMA, E. B.; SILVA, G. T. Mean acoustic fields exerted on a subwavelength axisymmetric particle. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 150, n. 1, p. 376–384, 2021.
- [Lopes et al. 2020]LOPES, J. H. et al. Acoustic spin transfer to a subwavelength spheroidal particle. *Physical Review E*, APS, v. 101, n. 4, p. 043102, 2020.
- [Machado 2004]MACHADO, K. D. *Equações diferenciais aplicadas à física*. [S.l.]: Editora UEPG, 2004.
- [Maidanik 1958]MAIDANIK, G. Torques due to acoustical radiation pressure. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 30, n. 7, p. 620–623, 1958.
- [Marzo et al. 2015]MARZO, A. et al. Holographic acoustic elements for manipulation of levitated objects. *Nature communications*, Nature Publishing Group UK London, v. 6, n. 1, p. 8661, 2015.
- [Mase 1970]MASE, G. E. *Continuum mechanics*. [S.l.]: McGraw-Hill New York, 1970. v. 970.
- [Mishchenko, Travis e Lacis 2002]MISHCHENKO, M. I.; TRAVIS, L. D.; LACIS, A. A. *Scattering, absorption, and emission of light by small particles*. [S.l.]: Cambridge university press, 2002.
- [Mishra, Hill e Glynne-Jones 2014]MISHRA, P.; HILL, M.; GLYNNE-JONES, P. Deformation of red blood cells using acoustic radiation forces. *Biomicrofluidics*, American Institute of Physics, v. 8, n. 3, p. 034109, 2014.
- [Mitri 2015]MITRI, F. Acoustic radiation force on oblate and prolate spheroids in bessel beams. *Wave Motion*, Elsevier, v. 57, p. 231–238, 2015.

-
- [Mitri 2016]MITRI, F. Radiation forces and torque on a rigid elliptical cylinder in acoustical plane progressive and (quasi) standing waves with arbitrary incidence. *Physics of Fluids*, AIP Publishing LLC, v. 28, n. 7, p. 077104, 2016.
- [Mitri e Silva 2011]MITRI, F.; SILVA, G. Off-axial acoustic scattering of a high-order bessel vortex beam by a rigid sphere. *Wave Motion*, Elsevier, v. 48, n. 5, p. 392–400, 2011.
- [Neto 2015]NETO, J. P. L. *Força e torque de radiação sobre uma partícula viscoelástica em um fluido ideal*. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Alagoas - Ufal, Maceió, Brazil, 2015.
- [Ozcelik et al. 2018]OZCELIK, A. et al. Acoustic tweezers for the life sciences. *Nature methods*, Nature Publishing Group US New York, v. 15, n. 12, p. 1021–1028, 2018.
- [Pierce 2019]PIERCE, A. D. *Acoustics: an introduction to its physical principles and applications*. [S.l.]: Springer, 2019.
- [Pierce 2019]PIERCE, A. D. Acoustics: An introduction to its physical principles and applications. *The Acoustical Society of America*, Springer, p. 489, 2019.
- [Qi e Geers 1998]QI, Q.; GEERS, T. L. Evaluation of the perfectly matched layer for computational acoustics. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 139, n. 1, p. 166–183, 1998.
- [Santos et al. 2021]SANTOS, H. D. et al. 3d-printed acoustofluidic devices for raman spectroscopy of cells. *Advanced Engineering Materials*, Wiley Online Library, v. 23, n. 10, p. 2100552, 2021.
- [Schwarz et al. 2015]SCHWARZ, T. et al. Rotation of fibers and other non-spherical particles by the acoustic radiation torque. *Microfluidics and Nanofluidics*, Springer, v. 18, n. 1, p. 65–79, 2015.
- [Schwarz, Petit-Pierre e Dual 2013]SCHWARZ, T.; PETIT-PIERRE, G.; DUAL, J. Rotation of non-spherical micro-particles by amplitude modulation of superimposed orthogonal ultrasonic modes. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 133, n. 3, p. 1260–1268, 2013.
- [Segel 2007]SEGEL, L. A. *Mathematics applied to continuum mechanics*. [S.l.]: SIAM, 2007. v. 52.
- [Shi et al. 2019]SHI, C. et al. Observation of acoustic spin. *National science review*, 2019.

-
- [Silva, Lobo e Mitri 2012]SILVA, G.; LOBO, T.; MITRI, F. Radiation torque produced by an arbitrary acoustic wave. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 97, n. 5, p. 54003, 2012.
- [Silva 2011]SILVA, G. T. An expression for the radiation force exerted by an acoustic beam with arbitrary wavefront (1). *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 130, n. 6, p. 3541–3544, 2011.
- [Silva 2011]SILVA, G. T. Off-axis scattering of an ultrasound bessel beam by a sphere. *IEEE transactions on ultrasonics, ferroelectrics, and frequency control*, IEEE, v. 58, n. 2, p. 298–304, 2011.
- [Silva 2014]SILVA, G. T. Acoustic radiation force and torque on an absorbing compressible particle in an inviscid fluid. *The Journal of the Acoustical Society of America*, ASA, v. 136, n. 5, p. 2405–2413, 2014.
- [Silva e Drinkwater 2018]SILVA, G. T.; DRINKWATER, B. W. Acoustic radiation force exerted on a small spheroidal rigid particle by a beam of arbitrary wavefront: Examples of traveling and standing plane waves. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 144, n. 5, p. EL453–EL459, 2018.
- [Silva et al. 2019]SILVA, G. T. et al. Particle patterning by ultrasonic standing waves in a rectangular cavity. *Physical Review Applied*, APS, v. 11, n. 5, p. 054044, 2019.
- [Silva et al. 2019]SILVA, G. T. et al. Acoustic deformation for the extraction of mechanical properties of lipid vesicle populations. *Physical Review E*, APS, v. 99, n. 6, p. 063002, 2019.
- [Teixeira e Chew 2000]TEIXEIRA, F.; CHEW, W. Complex space approach to perfectly matched layers: a review and some new developments. *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*, Wiley Online Library, v. 13, n. 5, p. 441–455, 2000.
- [Toftul et al. 2019]TOFTUL, I. et al. Acoustic radiation force and torque on small particles as measures of the canonical momentum and spin densities. *Physical review letters*, APS, v. 123, n. 18, p. 183901, 2019.
- [Wijaya e Lim 2015]WIJAYA, F. B.; LIM, K.-M. Numerical calculation of acoustic radiation force and torque acting on rigid non-spherical particles. *Acta Acustica united with Acustica*, S. Hirzel Verlag, v. 101, n. 3, p. 531–542, 2015.
- [Williams 1999]WILLIAMS, E. G. *Fourier acoustics: sound radiation and nearfield acoustical holography*. London, UK: Academic press, 1999.

-
- [Wolfram Research, Inc. 2022]Wolfram Research, Inc. *Mathematica*. 2022. Disponível em: <<https://www.wolfram.com/mathematica>>. Acesso em: 01 mar. 2022.
- [Wu et al. 2019]WU, M. et al. Acoustofluidic separation of cells and particles. *Microsystems & nanoengineering*, Nature Publishing Group UK London, v. 5, n. 1, p. 32, 2019.
- [Zhang e Marston 2011]ZHANG, L.; MARSTON, P. L. Acoustic radiation torque and the conservation of angular momentum (1). *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 129, n. 4, p. 1679–1680, 2011.
- [Zhang e Marston 2014]ZHANG, L.; MARSTON, P. L. Acoustic radiation torque on small objects in viscous fluids and connection with viscous dissipation. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 136, n. 6, p. 2917–2921, 2014.
- [Zhao, Thomas e Marchiano 2019]ZHAO, D.; THOMAS, J.-L.; MARCHIANO, R. Computation of the radiation force exerted by the acoustic tweezers using pressure field measurements. *The Journal of the Acoustical Society of America*, Acoustical Society of America, v. 146, n. 3, p. 1650–1660, 2019.

Apêndice A

Perfectly Matched Layers (PML)

PML, abreviação de Perfectly Matched Layers, são camadas artificiais de absorção utilizadas em simulações com equações de onda via métodos numéricos, como o método de elementos finitos (ver Cap. 4), de modo a emular um domínio fechado (finito) como um domínio aberto (infinito). As PMLs diferem de um material absorvente comum, ao propor que as ondas incidentes sobre a PML de um meio não-PML não sejam refletidas nessa interface, ou seja, se propõem a absorver fortemente as ondas de saída (ou espalhadas) de uma região computacional interna, sem refleti-las de volta para a região de interesse. O conceito de PML como condição de contorno absorvente foi proposta originalmente por Bérenger, em um sistema de equações de Maxwell [Berenger 1994]. Ao fornecer alta absorção de propagação de ondas, além de quase extinguir totalmente as reflexões da interface entre a PML e o domínio físico, logo se tornou um método atraente para o tratamento de problemas de domínio aberto para propagação de ondas acústicas [Qi e Geers 1998], elásticas [Hastings, Schneider e Broschat 1996] e eletromagnéticas [Teixeira e Chew 2000].

A formulação original de Berenger é chamada de PML de campo dividido, pois divide os campos eletromagnéticos em dois campos não físicos na região PML. Entretanto, outro método ganhou destaque por não necessitar de divisões de variáveis, o método de alongamento (ou esticamento) de coordenadas, o qual é baseado na transformação de coordenadas em domínios de PML, onde a coordenada real é mapeada no plano complexo [Johnson 2021]. Por exemplo, a equação em 1D de Helmholtz (ver Sec 2.3.2) é mapeada como [COMSOL 2019]:

$$\left[\frac{1}{f(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{f(x)} \frac{\partial}{\partial x} \right) + k^2 \right] \phi(x) = 0, \quad (\text{A.1})$$

onde

$$f(x) \in \mathbb{C}. \quad (\text{A.2})$$

A.1 Implementação de PML no COMSOL

No software que utilizamos, COMSOL Multiphysics [COMSOL 2016], a PML pode introduzir um alongamento em coordenadas complexas em uma, duas ou três direções, a depender do problema físico. Em cada direção é utilizada a mesma forma de alongamento, definida em função de uma coordenada adimensional ξ , que varia de 0 a 1 sobre a camada PML. A função retorna uma nova coordenada, complexa e estendida, dependendo do comprimento de onda típico para cada frequência da simulação. Ou seja, o deslocamento complexo para alongamento em uma única direção é dado por $\Delta x = \lambda f(\xi) - \Delta \xi$, onde λ é o comprimento de onda típico e $\Delta \xi$ é a largura original da PML. Para cada direção é calculado separadamente um deslocamento, e posteriormente são combinados em um deslocamento total. O Comsol dispõe de duas funções de alongamento predefinidas, polinomial e racional, além de permitir que o usuário defina uma função de alongamento de coordenada qualquer.

A.1.1 Função de alongamento polinomial

A função de alongamento de coordenada polinomial tem uma maior aplicabilidade, geralmente, quando ocorre uma mistura de diferentes tipos de onda no modelo, ao mesmo tempo em que há uma disponibilidade de aplicar ao menos 8 camadas de PML. A função polinomial é definida como [COMSOL 2019]

$$f_p(\xi) = s\xi^m(1 - i) \quad (\text{A.3})$$

onde s é o fator de escala e m é o fator de curvatura. Note que, nessa função as partes real e imaginária são iguais, o que significa que o método não faz suposições sobre o campo incidente na PML, as ondas propagantes e evanescentes com mesma escala de comprimento são tratadas da mesma forma. Com o fator de escala padrão, a PML proporciona uma atenuação máxima de 109 dB. Em comparação com o alongamento racional, este interfere menos na convergência de solucionadores iterativos.

A.1.2 Função de alongamento racional

A função de alongamento racional foi desenvolvida para ser mais eficiente em ondas propagantes com comprimentos de onda e ângulos de incidência mistos. A qual é definida como [COMSOL 2019]

$$f_r(\xi) = s\xi \left[\frac{1}{3m(1 - \xi) + 4} - \frac{i}{3m(1 - \xi)} \right] \quad (\text{A.4})$$

onde, novamente, s é o fator de escala e m é o fator de curvatura. A parte real da função racional de alongamento, dimensiona a espessura efetiva da PML para um quarto de um comprimento de onda típico, enquanto a parte imaginária, responsável pela atenuação, é estendida em direção ao infinito. Em outras palavras, tendo uma resolução de malha suficiente, a PML se propõe a absorver qualquer onda propagante.

A.1.3 Função de alongamento definida pelo usuário

Para funções de alongamento de coordenadas definidas pelo usuário, o software permite que o usuário especifique as partes reais e imaginárias da função ($f(\xi)$) separadamente, com um ou dois argumentos. Onde o primeiro argumento é tratado como a distância adimensional ξ e o segundo argumento, opcional, como o comprimento de onda típico λ .

A.1.4 Parâmetros da PML

- *O comprimento de onda típico (λ):* define o comprimento de onda mais longo das ondas propagantes em um meio infinito, geralmente sendo fornecido por uma interface física. Em meios não dispersivos, é pressuposto que sejam inversamente proporcionais à frequência, de modo que a PML possa funcionar de maneira semelhante para todas as frequências.
- *O fator de escala (s):* multiplica o comprimento de onda típico, gerando a espessura efetiva da PML, sendo que a capacidade de absorção da PML é diretamente proporcional ao número de comprimentos de onda efetivos através da PML na direção de alongamento. Reduzindo o fator para valores menores do que 1, obtemos uma solução com menos recursos de hardware, em detrimento da eficiência de absorção.
- *O parâmetro de curvatura (m):* é utilizado para realocar a resolução da malha dentro da PML. Havendo componentes dentro da PML que decaem muito mais rápido do que as ondas mais longas, a resolução deve ser aumentada nas proximidades da interface entre a PML e o domínio físico, o que pode ser feito aumentando o parâmetro de curvatura, assim movendo efetivamente os elementos de malha disponíveis em direção ao limite interno da PML, sendo necessário normalmente, quando o campo de onda incidente contém uma mistura de diferentes comprimentos de onda, ou uma mistura de ondas propagantes e evanescentes.

Por fim, embora funcione muito bem na maioria dos casos, existem algumas situações importantes em que a eficiência de absorção da PML é reduzida, gerando reflexos inevitáveis. As PMLs são totalmente isentas de reflexos apenas para a equação de onda contínua exata, uma vez que a equação de onda é discretizada em simulações computacionais, algumas pequenas reflexões numéricas aparecem (que podem desaparecer com o

ajuste da resolução). Além disso, a PML é bem mais eficiente para ondas com incidência paralela com a normal da interface PML-domínio físico, conforme o ângulo de incidência se afasta da normal a eficiência da PML diminui, algo que é difícil de ser contornado em problemas de espalhamento mais sensíveis, entretanto, ainda assim continua sendo mais eficiente que outros métodos de condição de contorno, como a condição de radiação de Sommerfeld [COMSOL 2015].

Apêndice B

Artigos publicados

Nas páginas a seguir, estão elencados (em ordem cronológica) todos os trabalhos, com seus respectivos resumos (em inglês), que foram publicados com a colaboração do autor desta tese, ao longo do seu doutorado.

Acoustic spin transfer to a subwavelength spheroidal particleJosé H. Lopes ¹, Everton B. Lima,² José P. Leão-Neto ³ and Glauber T. Silva ^{2,*}¹*Grupo de Física da Matéria Condensada, Núcleo de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alagoas, Arapiraca, Alagoas 57309-005, Brazil*²*Physical Acoustics Group, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, Alagoas 57072-970, Brazil*³*Campus Arapiraca/Unidade de Ensino Penedo, Universidade Federal de Alagoas, Penedo, Alagoas 57200-000, Brazil*

(Received 9 December 2019; accepted 11 March 2020; published 7 April 2020)

We demonstrate that the acoustic spin of a first-order Bessel beam can be transferred to a subwavelength (prolate) spheroidal particle at the beam axis in a viscous fluid. The induced radiation torque is proportional to the acoustic spin, which scales with the beam energy density. The analysis of the particle rotational dynamics in a Stokes flow regime reveals that its angular velocity varies linearly with the acoustic spin. Asymptotic expressions of the radiation torque and angular velocity are obtained for a quasispherical and infinitely thin particle. Excellent agreement is found between the theoretical results of radiation torque and finite-element simulations. The induced particle spin is predicted and analyzed using the typical parameter values of the acoustical vortex tweezer and levitation devices. We discuss how the beam energy density and fluid viscosity can be assessed by measuring the induced spin of the particle.

DOI: [10.1103/PhysRevE.101.043102](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.043102)**I. INTRODUCTION**

The spin angular momentum is a universal feature present in different contexts of nature. In classical electromagnetic waves and photons, the spin is caused by the circular polarization of electric and magnetic fields [1]. The electron spin can be regarded as due to a circulating flow of energy in the Dirac wave field [2]. More recently, the spin of acoustic beams was proposed and measured as a circulation of the fluid velocity field [3]. Subsequently, the spin and orbital angular momenta were theoretically analyzed in monochromatic acoustic wave fields in a homogeneous medium [4]. Before these studies, it was noticed that the longitudinal spin, in which the axis of rotation is parallel to the propagation direction of an acoustic Bessel beam, could induce the acoustic radiation torque on a subwavelength absorbing spherical particle [5].

The acoustic radiation torque is the time-averaged rate of change of the angular momentum caused by an acoustic wave on an object [6]. This subject was extensively studied for spherical particles in Refs. [7–13]. In a nonviscous fluid, the radiation torque on a spherical particle only occurs if the particle absorbs acoustic energy [8]. Albeit, nonabsorbing particles without spherical symmetry may develop the radiation torque. Notable examples are microfibers [14] and nanorods [15]. Some numerical methods have been employed to study the radiation torque on spheroids [16,17].

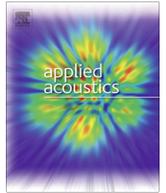
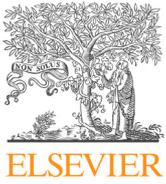
Despite the importance of the aforementioned numerical studies, they do not reveal the full physical picture of the acoustic radiation torque. Also, no investigation on the acoustic spin transfer to a spheroidal particle in a viscous fluid was performed to date. We are not the first to theoretically investigate the acoustic radiation torque effects on spheroids. However, the previous work by Fan *et al.* [18] is mainly

devoted to developing a general theoretical scheme for arbitrarily shaped particles.

The goal of this paper is to put the acoustic radiation torque on a spheroidal particle in a new perspective by establishing its connection with the acoustic spin. To this end, we consider a first-order Bessel vortex beam (FOBB) in broadside incidence to a subwavelength spheroidal particle in the beam axis. Our choice relies on the fact that the acoustic FOBB possesses spin, which corresponds to the local expectation value of a spin-1 operator [4]. This beam not only may produce a radiation torque on the particle but also a time-averaged force, known as the acoustic force [19–21]. Besides, some symmetry considerations have motivated the choice for a prolate spheroidal particle. This object has axial symmetry (i.e., it is invariant to a rotation around the major axis). In particle physics terms, we may classify the prolate spheroid as a spin-0 particle concerning axial rotations. On the other hand, rotations around the minor axis (transverse rotations) can be described by the interfocal vector, which has a 2π rotational symmetry. Under this circumstance, the prolate spheroid can be regarded as a spin-1 particle. At this point, we contemplate that the FOBB spin can only induce a transverse spin on the spheroid, which is a spin-1 particle.

Our paper is outlined as follows. First, we calculate the spin of a Bessel beam. Afterward, we obtain the radiation torque considering a nonviscous fluid by solving the related scattering problem in spheroidal coordinates and integrating the result in a far-field spherical surface. We then establish the spin-torque relation and obtain simple asymptotic expressions of the torque as the particle geometry approaches a sphere and an infinitely thin spheroid. Assuming a Stokes flow as the particle spins around its minor axis [22], we derive the relation between the acoustic spin and angular velocity. We predict the angular velocity of microparticles using the typical parameter values of the acoustic levitation [23] and acoustical vortex tweezer [24] devices. Additionally, the theoretical predictions

*gtomaz@fis.ufal.br



An image formation model for ultrasound superresolution using a polymer ball lens

Everton B. Lima^a, Victor H.S. Santos^a, André L. Baggio^a, José H. Lopes^b, José P. Leão-Neto^b, Glauber T. Silva^{a,*}

^aPhysical Acoustics Group, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil

^bGrupo de Física da Matéria Condensada, Núcleo de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alagoas, Arapiraca Alagoas, 57309-005, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 2 April 2020

Received in revised form 10 June 2020

Accepted 17 June 2020

Keywords:

Ultrasound superresolution

Image formation

Acoustic beamforming

ABSTRACT

Ultrasonic superresolution images can be generated using a polymer ball lens. Here, we provide an image formation model for this superresolution imaging method. The imaging system is comprised of a circular flat transducer operating in pulse-echo mode with a central frequency of 1 MHz, and a ball lens centered in the beam axis of symmetry. The wavelength in water is $\lambda_0 = 1.5$ mm. The system experimentally achieves a resolution of $0.6\lambda_0$ in the focal plane at one wavelength away from the lens. Finite-element simulations are performed to compute the point-spread function of the system. The obtained numerical results are remarkably consistent with experimental data. For illustration purpose, the superresolution method is compared with a conventional ultrasonic system based on a spherically focused transducer. Our technique presents twice more resolution with a shorter depth-of-field of $2\lambda_0$. Possible applications that take advantage of these features are discussed, as well as some limitations of the proposed technique.

© 2020 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The spatial resolution of ultrasonic imaging systems is primarily restricted by the diffraction limit (i.e., beam focusing in a disk roughly with one wavelength diameter) [1]. The resolution is proportional to the focal length and inversely proportional to the transducer aperture. The diffraction limit thwarts subwavelength focusing at a given frequency. A finer resolution can be achieved by increasing the frequency at the expense of less ultrasound penetration due to absorption and also a high-cost electronics.

Different methods have overcome the ultrasonic diffraction limit. Notably, harmonic generation was used to make images at a doubled frequency, which means an improvement of 100% is the spatial resolution [2,3]. Nonlinear ultrasonic wave mixing forms images at the difference-frequency with the fundamental high-frequency resolution [4–6]. Also, the nonlinear wave interaction gives rise to a sum-frequency component (i.e., the sum of the fundamental frequencies) that can be used to form superresolution images [7]. Another approach uses the time-reversal wave phenomenon to focus an ultrasound beam [8]. Lenses made of a phononic crystal [9] and metamaterial [10] also showed promising results on focusing ultrasonic beams beyond the diffraction limit.

By using ultra-fast acquisitions based on plane wave transmissions at the rate of a thousand frames per second, the image of ultrasound contrast agents (microbubbles) in echography surpassed the diffraction limit by more than a tenfold [11]. Algorithm-based methods that aim at reducing the dependence of resolution on pulse shape and width can also produce superresolution images [12,13]. Despite early success, these approaches may involve complex material engineering, low efficiency, or intense signal processing algorithms. Desirably, superresolution methods should have scalability varying with the wavelength with relatively simple electronics to find practical applications in biomedical imaging, nondestructive testing, and acoustic microscopy.

Recently, it has been theoretically, numerically, and experimentally demonstrated that a polymer ball lens can focus an ultrasonic beam beyond the diffraction limit [14,15]. The beam width can be even smaller than half-wavelength with a depth-of-field of few wavelengths. The focal region takes place in the lens shadow region, which is centered at one wavelength (or more) away from the lens, and the resulting wave is non-evanescent. Some preliminary numerical results on ball lens superfocusing have been investigated in Ref. [16]. Superresolution is also achieved by employing a cylindrical-shaped lens [17] and liquid-liquid core-shell lens [18]. These features are particularly suitable for enhancing the imaging performance of ultrasonic systems.

* Corresponding author.

E-mail address: gtomaz@fis.ufal.br (G.T. Silva).

Nonlinear Interaction of Acoustic Waves with a Spheroidal Particle: Radiation Force and Torque Effects

Everton B. Lima,¹ José P. Leão-Neto,² Alisson S. Marques,¹ Giclênio C. Silva¹,¹ José H. Lopes^{1,3},¹ and Glauber T. Silva^{1,*}

¹*Physical Acoustics Group, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil*

²*Campus Arapiraca/Unidade de Ensino Penedo, Universidade Federal de Alagoas, Penedo, AL 57200-000, Brazil*

³*Grupo de Física da Matéria Condensada, Núcleo de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alagoas, Arapiraca, AL 57309-005, Brazil*



(Received 17 April 2020; revised manuscript received 15 May 2020; accepted 18 May 2020; published 19 June 2020)

The nonlinear interaction of a time-harmonic acoustic wave with an anisotropic particle gives rise to the radiation force and torque effects. These phenomena are at the heart of the acoustofluidics technology, where microparticles such as cells and micro-organisms are acoustically manipulated. We present a theoretical model considering a generic acoustic beam interacting with a subwavelength spheroidal particle in a nonviscous fluid. Concise analytical expressions of the radiation force and torque are obtained in the scattering dipole approximation. The radiation force is given in terms of a gradient and scattering force; while the radiation torque has two fundamental contributions, namely, the momentum arm and acoustic spin (spin-torque effect). As a practical example, we use the theory to describe the interaction of two crossed plane waves and a prolate spheroidal particle. The results reveal the particle is transversely trapped in a pressure node and is axially pushed by the radiation force. Also, the momentum arm aligns the particle in the axial direction. At certain specific positions, only the spin-torque occurs. Our findings are remarkably consistent with finite-element simulations. The success of our model enables its use as an investigation tool for the manipulation of anisotropic microparticles in acoustofluidics.

DOI: [10.1103/PhysRevApplied.13.064048](https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.13.064048)

I. INTRODUCTION

The behavior of microparticles under an ultrasonic acoustic wave has been extensively analyzed in microacoustofluidic devices [1,2]. Notable examples include separation of circulating tumor cells [3], cell and microparticle patterning [4,5], assessment of the membrane elasticity of cells by acoustic deformation [6,7], and selective acoustic tweezer [8]. The nonlinear wave-particle interaction gives rise to the phenomena of acoustic radiation forces and torques [9]. The careful control of these effects enables particle handling in micrometer-sized cavities or microchannels with a plethora of applications in biotechnology and analytical chemistry.

The acoustic radiation forces and torques are commonly investigated considering isotropic particles, i.e., with a spherical shape. In reality, the morphology of most cells and other micro-organisms have a degree of asymmetry. Prominent examples of acoustofluidic systems for manipulation of asymmetric particles include glass fibers [10], *Escherichia coli* bacterium [11], red blood cells [12], microfibers [13], and alumina microdisks [14]. Other

experiments have been performed in acoustic levitation systems in air [15–17]. Understanding how acoustic forces and torques develop on anisotropic microparticles is key to dynamic analysis, as well as to devise applications of acoustofluidic methods. Additionally, these phenomena seem to have a crucial role in the propelling mechanisms of microswimmers under an ultrasound field [18,19].

At first glance, the available alternative to model the wave interaction with anisotropic particles is the use of numerical techniques, such as the finite- [10,14,20–22] and boundary- [23] element methods, numerical quadrature [24,25], and *T*-matrix approach [26]. In general, numerical methods demand high-performance computing and high memory usage for three-dimensional simulations. Moreover, it is also challenging to determine the behavior of the wave-particle system as one or more parameters vary continuously.

Early studies involving anisotropic particles dealt with the radiation torque problem on circular disks [27–30]. Some other investigations have been surveyed in Ref. [31]. More recently, efforts have been devoted to describing the acoustic radiation force [32,33] and torque [34–36] on spheroidal particles. Also, an approach based the Born approximation was used to obtain the radiation force and

*gtomaz@fis.ufal.br

RESEARCH ARTICLE

3D-Printed Acoustofluidic Devices for Raman Spectroscopy of Cells

Harrison D. A. Santos,* Amanda E. Silva, Giclênio C. Silva, Everton B. Lima, Alisson S. Marques, Magna S. Alexandre-Moreira, Aline C. Queiroz, Carlos Jacinto, J. Henrique Lopes, Uéslen Rocha,* and Glauber T. Silva*

Acoustofluidics technology can be used to trap live cells (and also micro/nanoparticles) in microenvironments suitable for cell assays. Herein, a cheap and easy-to-fabricate device is proposed that works with Raman spectroscopy for biosensing applications. The device comprises a 3D-printed microchamber working as a half-wavelength acoustic resonator. By tuning the resonance frequency with a low voltage (≈ 4 V), cells or particles are aggregated and levitated in seconds by the action of the acoustic radiation force. Based on finite element simulations, the radiation force field produced inside the device is described. In the cellular enrichment (aggregation) process, a metastable honeycomb lattice is formed mostly due to the cell-to-cell attraction caused by the secondary acoustic radiation force. Orderly and metastable levitating aggregates provide an excellent arrangement for Raman spectroscopy to investigate cells individually. Polystyrene particles are used for the device characterization and Raman acquisition process. Biosensing applications are showcased with live murine macrophages J774.A1, which are used in infection assay of leishmaniasis disease. The unique features of the device, e.g., simple fabrication process with cheap materials, simple operation, fast time response, and formation of metastable cellular aggregates; hold a noteworthy potential for applications in life sciences and biotechnology involving cell assays.

torque)^[6–10] generated by ultrasonic waves in microfluidic lab-on-a-chip devices. In a typical arrangement, microparticles or cells are injected into a small-volume resonant microchamber or microchannel of an acoustofluidic device (with a few microliters or less), and the acoustic radiation force aggregates them in a levitating state.^[11,12] Most acoustofluidic devices are easily integrated into microscopy settings.^[13] Moreover, it has been demonstrated that acoustically trapped cells have been kept alive for as long as seven days.^[14] Compared with optical tweezer methods, which are also used for cell handling, acoustofluidics generally uses less power upon cells.^[15]

Raman spectroscopy^[16] is a label-free optical method that can determine the cell chemical structure, including proteins, lipids, and DNA assessed according to their molecular vibrational modes. There has been an increasing interest in Raman spectroscopy of live cells,^[17] in part because it may allow observations of how cellular dynamics and metabolism change under the influence of

an external agent (drug or substance).^[18] Commonly, Raman signals obtained from seeded cells onto a substrate can be masked by information pertaining to the substrate's surface. The acoustic levitation of a sample under analysis can significantly reduce the background signal to the acquired spectrum. The unique features of the aforementioned acoustofluidics, e.g., a microenvironment for a

1. Introduction

Acoustofluidics harbors a collection of methods that are promoting a revolution in the manipulation, patterning, and analysis of cells and particles at the micro/nanoscale.^[1–5] These methods use the mean acoustic fields (i.e., the acoustic radiation force and

H. D. A. Santos, A. E. Silva, G. C. Silva, E. B. Lima, A. S. Marques, U. Rocha, G. T. Silva

Physical Acoustics Group, Institute of Physics
Federal University of Alagoas
Maceió, Brazil

E-mail: harrison2011@gmail.com; ueslen.silva@fis.ufal.br;
gtomaz@fis.ufal.br

J. Henrique Lopes
Acoustics and Applications Group, Exact Sciences Nucleus
Federal University of Alagoas (Campus Arapiraca)
Arapiraca, Brazil

 The ORCID identification number(s) for the author(s) of this article can be found under <https://doi.org/10.1002/adem.202100552>.

DOI: 10.1002/adem.202100552

A. E. Silva, M. S. Alexandre-Moreira
Laboratory of Pharmacology and Immunology
Institute of Biological Sciences and Health
Federal University of Alagoas
Maceió, Brazil

A. C. Queiroz
Center of Medical Sciences and Nursing
Federal University of Alagoas
Campus Arapiraca, Maceió, Brazil

C. Jacinto, U. Rocha
Group of Nanophotonics and Images, Institute of Physics
Federal University of Alagoas
Maceió, Brazil

Development and Characterization of a Superresolution Ultrasonic Transducer

José P. Leão-Neto¹, Everton B. de Lima², João Henrique Uliana, Theo Z. Pavan¹,
Glauber T. Silva¹, *Member, IEEE*, and José H. Lopes¹

Abstract—Highly sensitive ultrasound probes are needed to expand the capabilities of biomedical ultrasound and industrial nondestructive testing (NDT). Pursuing better imaging quality, while keeping fabrication costs low, is an important trend in the current development of ultrasound imaging systems. In this article, we report the development and characterization of an ultrasonic transducer that (super)focuses ultrasonic waves beyond the so-called diffraction limit, that is, the beamwaist is roughly narrower than one wavelength. The transducer comprises an additive manufactured case with a circular flat piezoelectric actuator fixed at the bottom and a core-shell lens (with a stainless steel core and a polymer shell) placed at the probe's conical tip. The core-shell lens is responsible to superfocusing effect of ultrasonic waves. Operating at approximately 3 MHz, the transverse and axial resolution for C- and B-scan images are, respectively, 0.65λ and $3\lambda/2$, with the wavelength being $\lambda = 0.5$ mm. The system depth-of-field is 6.3λ . To demonstrate the transducer capability to resolve subwavelength structures, we successfully obtain images of a copper wire forming a Y-intersection, whose branches a diameter similar to human hair (0.15 mm $\approx 0.3\lambda$). Our results represent a solid step toward the development of ultrasonic superresolution transducer applied for biomedical imaging and shallow NDT of materials.

Index Terms—Diffraction limit, subwavelength ultrasonic focusing, superresolution imaging.

I. INTRODUCTION

FOCUSED ultrasonic fields are the cornerstone of ultrasound biomedical imaging [1]–[3], nondestructive testing (NDT) of materials [4], and acoustic microscopy. The main role of a focused beam is to assess local fluctuations of mechanical properties, such as compressibility and density, of biological tissue and material failures in a region of interest

Manuscript received September 6, 2021; accepted October 31, 2021. Date of publication November 10, 2021; date of current version January 26, 2022. This work was supported in part by the Brazilian Agency Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico-CNPq under Grant 311107/2020-6, Grant 309375/2018-5, and Grant 437757/2018-8. (Corresponding author: José H. Lopes.)

José P. Leão-Neto and José H. Lopes are with the Acoustics and Application Group, Federal University of Alagoas, 57309 Arapiraca, Brazil (e-mail: fis.neto@gmail.com; jose.andrade@arapiraca.ufal.br).

Everton B. de Lima and Glauber T. Silva are with the Physical Acoustics Group, Institute of Physics, Federal University of Alagoas, 57072 Maceió, Brazil.

João Henrique Uliana and Theo Z. Pavan are with the Department of Physics, FFCLRP, University of São Paulo, 14040 Ribeirão Preto, Brazil. Digital Object Identifier 10.1109/TUFFC.2021.3125766

(ROI). A key feature of ultrasonic imaging is the system resolution which corresponds to the ability to resolve discrete elements. The imaging resolution depends on many factors and properties of the system and scanned patient or object, which includes transducer geometry, frequency, and bandwidth, as well as postprocessing electronics, and mechanical properties of the inquired medium. From the wave propagation point of view, the system resolution can be improved by tightly focusing the ultrasonic incident beam.

Conventional ultrasound focusing schemes are limited by diffraction. For example, the beam produced by a spherically focused transducer is limited to a circular spot, also known as the Airy disk, of diameter [5] $d = 1.22F\lambda$, with F and λ being the transducer f-number (i.e., the focal distance to aperture ratio) and wavelength. Usually the f-number is larger than one, that is, $F > 1$. As a result of the diffraction limit just presented, two neighboring points can only be resolved by the spherically focused transducer if their inter-distance exceeds $1.22\lambda F$. The easiest route to improve the ultrasonic resolution is to increase frequency. This follows at the expense of enhancing ultrasound attenuation as it varies with frequency squared in liquids, for instance.

Several techniques have aroused to deceive the diffraction limit including harmonic imaging [6], lens based on metamaterial [7]–[10] and phononic crystals [11]–[13], nonlinear ultrasound mixing [14]–[17], and time-reversal mirror [18], [19]. Methods based on nonlinear properties of ultrasonic wave propagation such as second-harmonic generation and wave mixing have been successfully applied to biomedical imaging. The other subwavelength focusing methods are still finding some difficult to be established in the ultrasonic imaging realm. In part, because of the need for an elaborate hardware or challenges in metamaterial fabrication to meet beam focusing in the megahertz-frequency range.

Recently, a simple subwavelength focusing approach was proposed using a ball-shaped lens made of plastic (rexolite) with several wavelengths of diameter [20]. The apparatus yields a transverse resolution of about $\lambda/2$. Also, a core-shell lens, with the outer layer made of a thermoplastic polymer and filled with ethanol, superfocused an ultrasound beam in water to a 0.85λ spot [21]. Other arrangements using lenses with different geometries such as cylindrical, cuboid, and Fresnel shapes yield a resolution even smaller than $\lambda/2$ [22]–[31]. Ultrasonic images have successfully generated with the

Mean acoustic fields exerted on a subwavelength axisymmetric particle

Everton B. Lima¹ and Glauber T. Silva^{1, a}

Physical Acoustics Group, Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL 57072-970, Brazil

(Dated: 3 April 2022)

The acoustic radiation force produced by ultrasonic waves is the “workhorse” of particle manipulation in acoustofluidics. Nonspherical particles are also subjected to a mean torque known as the acoustic radiation torque. Together they constitute *the mean-acoustic fields* exerted on the particle. Analytical methods alone cannot calculate these fields on arbitrarily shaped particles in actual fluids and are no longer fit for purpose. Here, a semi-analytical approach is introduced for handling subwavelength axisymmetric particles immersed in an isotropic Newtonian fluid. The obtained mean-acoustic fields depend on the scattering coefficients that reflect the monopole and dipole modes. These coefficients are determined by numerically solving the scattering problem. Our method is benchmarked by comparison with the exact result for a subwavelength rigid sphere in water. Besides, a more realistic case of a red blood cell immersed in blood plasma under a standing ultrasonic wave is investigated with our methodology.

©2022 Acoustical Society of America. [[https://doi.org\(DOI number\)](https://doi.org(DOI number))]

[XYZ]

Pages: 1–11

I. INTRODUCTION

Acoustofluidics is extensively based on the acoustic radiation force¹ produced by ultrasonic waves to control and pattern micro/nanoparticles (cells, microorganisms, and viruses) in a liquid medium. Nonspherical particles are also accompanied by the acoustic radiation torque.² The time-averaged radiation force and torque are referred to as *the mean-acoustic fields* that drive the particle dynamics in most acoustofluidic settings.

The analytical solutions for the mean-acoustic fields depend, apart from the incoming wave, on the geometric shape^{3–15} and material properties^{16–22} of the particle. Moreover, the viscous^{23–26} and thermodynamic²⁷ properties of the surrounding fluid can significantly change the mean-acoustic fields on the particle. The solutions mentioned above are found for particles with a simple geometric shape, such as spheres and spheroids. Generally, these solutions are derived with the multipole expansion and angular spectrum methods. The equivalence of these theoretical approaches have been demonstrated in Ref. 28.

The mean-acoustic fields exerted on particles with more elaborate geometries are usually obtained through numerical techniques such as the finite element^{29–31} and boundary element³² method. Nevertheless, numerical methods compute the mean-acoustic fields for a given spatial configuration (position and orientation) of the particle relative to the incoming wave. To determine the particle position and orientation versus time, the mean-

acoustic fields have to be re-calculated at each time step in the interval of interest. As a consequence, particle dynamics analysis in acoustofluidics might be a very intense computational task. We emphasize that such analysis is of fundamental importance for understanding and designing micro/nanorobots propelled by ultrasound.³³

In acoustofluidics, subwavelength nonspherical particles, which are much smaller than the wavelength, have been conveniently modeled as small spheres mainly because they fit the simple analytical expressions of the radiation force³⁴ and torque.⁴ obtained in the scattering dipole approximation. Recently, analytical results considering a subwavelength spheroidal particle were also derived in the dipole approximation.³⁵ We stress that a complete theoretical description of the mean-acoustic fields for subwavelength particles of arbitrary geometry in an actual fluids seems to be unattainable.

This article proposes a semi-analytical approach to describe the mean-acoustic fields interacting with an arbitrary axisymmetric particle in Newtonian thermoviscous fluids. The obtained fields are related to the pressure and fluid velocity of the incident wave and the coefficients of the monopole and dipole modes of the scattered waves. These coefficients are obtained from the projection of the scattered pressure onto the angular part of the corresponding mode (monopole and dipole). In turn, the scattered pressure is obtained via a finite element solver. The numerical part of our method is verified against the exact solution for a rigid spherical particle in a lossless fluid. Besides, we apply our method to compute the mean-acoustic fields exerted on a red blood cell by a standing plane wave in blood plasma. The results, such as trap location and spatial orientation of the RBC,

^agtomaz@fis.ufal.br