Tratamento numérico da mecânica de interfaces
lipídicas: modelagem e simulação

Diego Samuel Rodrigues

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Diego Samuel Rodrigues

Tratamento numérico da mecânica de interfaces lipídicas: modelagem e simulação

Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências - Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Gustavo Carlos Buscaglia

USP – São Carlos
Novembro de 2015

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

R696t Rodrigues, Diego Samuel
Tratamento numérico da mecânica de interfaces
lipídicas: modelagem e simulação / Diego Samuel
Rodrigues; orientador Gustavo Carlos Buscaglia. --
São Carlos, 2015.
157 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Ciências de Computação e Matemática Computacional) --
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
Universidade de São Paulo, 2015.

1. Energia de Canham-Helfrich. 2. Operador de
Boussinesq-Scriven. 3. Operador de Laplace-
Beltrami. 4. Método dos Elementos Finitos. 5.
Membranas lipídicas. I. Buscaglia, Gustavo Carlos,
orient. II. Título.

Diego Samuel Rodrigues

**A numerical approach to the mechanics of lipid interfaces:
modeling and simulation**

Doctoral dissertation submitted to the Instituto de
Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC-
USP, in partial fulfillment of the requirements for the
degree of the Doctorate Program in Computer
Science and Computational Mathematics. *FINAL
VERSION*

Concentration Area: Computer Science and
Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Gustavo Carlos Buscaglia

**USP – São Carlos
November 2015**

Para meus sobrinhos William e Fellipe

Agradecimentos

A Deus;

Aos meus pais Narciso e Antonia, pela vida;

Ao meu irmão Wendel e minha cunhada Michelle, pelo carinho;

Aos meus sobrinhos William e Fellipe, pela alegria;

À Ivana... pelo amor!

Aos meus amigos, pelo amizade;

Ao meu orientador Gustavo C. Buscaglia, pelo conhecimento;

Aos professores Roberto F. Ausas e Fernando Mut, pela ajuda científica;

Ao ICMC-USP, pela matemática;

A Rainald Löhner, pelo provimento do *software* de remalhagem;

Por último, mas não menos importante, agradeço à FAPESP pela bolsa de estudo e pelo pleno auxílio financeiro durante a realização de meu projeto de doutorado (processo nº 2011/01800-5).

Não sou jovem o suficiente para saber tudo.

Oscar Wilde

Sumário

1. Membranas lipídicas	1
1.1. Motivação biológica	1
1.2. Modelagem física	8
1.2.1. Mecânica de interfaces imersas em fluidos	10
2. Formulações de elementos finitos para escoamentos viscosos em domínios euclidianos e curvos	13
2.1. Equações governantes e abordagem numérica	13
2.1.1. Formulação variacional	14
· Uma formulação variacional discreta geral	14
· Estabilização quando $\mathbf{r}_u$ e $\mathbf{r}_p$ são o resíduo da equação de momento . .	17
· Estabilização por projeção do gradiente de pressão (SPGP)	17
2.2. Elemento de Zienkiewicz na aproximação da velocidade	19
2.2.1. Resultados numéricos	23
2.2.2. Condições de contorno, domínio computacional e malhas	23
2.2.3. Estudos de convergência	24
2.3. Operador de Boussinesq-Scriven	26
2.4. Elementos finitos superficiais	30
2.4.1. Superfícies trianguladas	31
2.4.2. Discretização espacial do problema de Boussinesq-Scriven	33
2.4.3. Discretização espaço-temporal do problema de Boussinesq-Scriven . .	39
3. Energia configuracional membranal	43
3.1. Energia de Canham-Helfrich	43
3.1.1. Geometrias lipossomais de energia mínima	45
· Equilíbrios estáticos de formas bidimensionais	46
· Equilíbrios estáticos de formas tridimensionais axissimétricas	48
3.2. Superfícies de evolução	50
3.2.1. Escoamento de Willmore	51

3.2.2. Força elástica e curvaturas discretas	51
4. Um método de elementos finitos para superfícies viscosas com rigidez de curvatura	55
4.1. Operador de Boussinesq-Scriven e força de Canham-Helfrich	55
4.1.1. Restrições de área superficial e volume interior	56
4.1.2. Formulação variacional	58
4.1.3. Problema dinâmico	60
4.1.4. Remalhagem	61
4.1.5. Escalas de adimensionalização	62
4.2. Resultados numéricos	64
4.2.1. Experimentos de relaxação	64
· Limite de estabilidade temporal	64
· Convergência	67
· Formas estáticas de equilíbrio e dinâmica de relaxação	67
· Distorções de malha em equilíbrio estático	70
· Relaxação de superfícies de gênero não-nulo	72
· Osmose	78
· Membranas de área variável: $\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} \neq 0$	83
· Força tangencial & deformação normal	84
4.2.2. Pinçamento membranar	85
· Motivação e modelagem física	85
· Modelagem numérica	87
· Efeitos dinâmicos de forma	89
· Equilíbrio dinâmico	89
· Robustez	91
4.3. Observações finais	97
5. Superfícies viscosas com rigidez de curvatura e <i>borda</i>	99
5.1. Motivação biológica e modelagem	99
5.2. Formulação variacional	103
5.2.1. Dinâmica de membranas elásticas: princípio do trabalho virtual	103
5.2.2. Problema discreto no espaço a tempo contínuo	103
5.2.3. Problema discreto no espaço e no tempo	104
5.3. Modelo de Euler-Plateau	105
5.3.1. Experimentos numéricos	106
5.4. Modelo de Euler-Canham-Helfrich	111
5.4.1. Experimentos numéricos	113
5.5. Observações finais	115
6. Considerações finais	117

Apêndice	121
A. Cálculo em superfícies	121
B. Operador de Boussinesq-Scriven: observações	128
C. Rudimentos de topologia de superfícies	131
C.1. Característica de Euler	131
C.2. Gênero	131
C.3. Teorema de Gauss-Bonnet	131
D. Curvas planas e geometrias lipossomais de energia mínima	133
D.1. Formas bidimensionais	133
D.2. Formas tridimensionais axissimétricas	134
E. Escoamento de uma superfície cilíndrica viscosa com rigidez de curvatura: solução analítica	137
Referências	145

Resumo

A mecânica celular jaz nas propriedades materiais da membrana plasmática, fundamentalmente uma bicamada fosfolipídica com espessura de dimensões moleculares. Além de forças elásticas, tal material bidimensional também experimenta tensões viscosas devido ao seu comportamento fluido (presumivelmente newtoniano) na direção tangencial. Apesar da notável concordância entre teoria e experimentos biofísicos sobre a geometria de membranas celulares, ainda não se faz presente um método computacional para simulação de sua (real) *dinâmica viscosa* governada pela lei de Boussinesq-Scriven. Assim sendo, introduzimos uma formulação variacional mista de três campos para escoamentos viscosos de superfícies fechadas curvas. Nela, o fluido circundante é levado em conta considerando-se uma restrição de volume interior, ao passo que uma restrição de área corresponde à inextensibilidade. As incógnitas são a velocidade, o vetor curvatura e a pressão superficial, todas interpoladas com elementos finitos lineares contínuos via estabilização baseada na projeção do gradiente de pressão. O método é semi-implícito e requer a solução de apenas um único sistema linear por passo de tempo. Outro ingrediente numérico proposto é uma força que mimetiza a ação de uma pinça óptica, permitindo interação virtual com a membrana, onde a qualidade e o refinamento de malha são mantidos por remalhagem adaptativa automática. Extensivos experimentos numéricos de dinâmica de relaxação são apresentados e comparados com soluções quasi-analíticas. É observada estabilidade temporal condicional com uma restrição de passo de tempo que escala como o quadrado do tamanho de malha. Reportamos a convergência e os limites de estabilidade de nosso método e sua habilidade em prever corretamente o equilíbrio dinâmico de compridas e finas elongações cilíndricas (*tethers*) que surgem a partir de pinçamentos membranais. A dependência de forma membranar com respeito a uma velocidade imposta de pinçamento também é discutida, sendo que há um valor limiar de velocidade abaixo do qual um *tether* não se forma de início. Testes adicionais ilustram a robustez do método e a relevância dos efeitos viscosos membranais quando sob a ação de forças externas. Sem dúvida, ainda há um longo caminho a ser trilhado para o entendimento completo da mecânica celular (há de serem consideradas outras estruturas tais como citoesqueleto, canais iônicos, proteínas transmembranares, etc). O primeiro passo, porém, foi dado: a construção de um esquema numérico variacional capaz de simular a intrigante dinâmica das membranas celulares.

Palavras-chave: Energia de Canham-Helfrich, Operador de Boussinesq-Scriven, Operador de Laplace-Beltrami, Cálculo Tangencial, Método dos Elementos Finitos, Formulações Variacionais Mistas, Fluidos Superficiais Newtonianos, Mecânica Celular, Lipossomas, Membranas Fosfolípídicas, *Membrane Tethering*.

Abstract

Cell mechanics lies on the material properties of the plasmatic membrane, fundamentally a two-molecule-thick phospholipid bilayer. Other than bending elastic forces, such a two-dimensional interfacial material also experiences viscous stresses due to its (presumably Newtonian) surface fluid tangential behaviour. Despite the remarkable agreement on membrane shapes between theory and biophysical experiments, there is no computational method for simulating its (actual) *viscous dynamics* governed by the Boussinesq-Scriven law. Accordingly, we introduce a mixed three-field variational formulation for viscous flows of closed curved surfaces. In it, the bulk fluid is taken into account by means of an enclosed-volume constraint, whereas an area constraint stands for the membrane's inextensible character. The unknowns are the velocity, vector curvature and surface pressure fields, all of which are interpolated with linear continuous finite elements by means of a pressure-gradient-projection scheme. The method is semi-implicit and it requires the solution of a single linear system per time step. Another proposed ingredient is a numerical force that emulates the action of an optical tweezer, allowing for virtual interaction with the membrane, where mesh quality and refinement are maintained by adaptively remeshing. Extensive relaxation experiments are reported and compared with quasi-analytical solutions. Conditional time stability is observed, with a time step restriction that scales as the square of the mesh size. We discuss both convergence and the stability limits of our method, its ability to correctly predict the dynamical equilibrium of the tether due to tweezing. The dependence of the membrane shape on imposed tweezing velocities is also addressed. Basically, there is a threshold velocity value below which the tether's shape does not arise at first. Further tests illustrate the robustness of the method and show the significance of viscous effects on membrane's deformation under external forces. Undoubtedly, there is still a long way to track toward the understanding of cellular mechanics (one still has to account other structures such as cytoskeleton, ion channels, transmembrane proteins, etc). The first step has given, though: the design of a numerically robust variational scheme capable of simulating the engrossing dynamics of fluid cell membranes.

Keywords: Canham-Helfrich Energy, Boussinesq-Scriven Operator, Laplace-Beltrami Operator, Tangential Calculus, Finite Element Methods, Mixed Variational Formulations, Newtonian Surface Fluids, Cell Mechanics, Liposomes, Phospholipid Membranes, Membrane Tethering.

Capítulo

1

Membranas lipídicas

1.1. Motivação biológica

A célula é a unidade fundamental da vida; toda a pluralidade dos seres vivos dela provém. Embora pertença ao âmago das ciências biológicas, sua etimologia remonta ao físico Robert Hook, que em seu tratado *Micrographia* denominou as estruturas poliédricas da cortiça de *células*¹ (Hook, 1665). Seu mais novo invento da época, o microscópio de múltiplas lentes, não só contribuiu para o advento da palavra célula, senão que anos mais tarde se tornou uma poderosa e indispensável ferramenta da biologia experimental, revolucionando-a.

Devido à especificidade envolvida em cada uma de suas funções vitais, toda célula possui pequenos órgãos denominados *organelas*, alguns unitários (*e.g.*, complexo de Golgi e núcleo celular), outros numerosos (centenas a milhares; *e.g.*, mitocôndria). Quanto à sua organização estrutural, as células são classificadas em eucarióticas e procarióticas. As primeiras são mais complexas e encontradas em organismos multicelulares; as últimas, seres unicelulares cujo exemplo mais usual são as bactérias.

A despeito de classificações, a estrutura mecânica de qualquer célula é composta basicamente de citoesqueleto e membrana plasmática (itens 7 e 14 da Figura 1.1). O citoesqueleto tem por função ancorar organelas, enquanto que a membrana plasmática é responsável por separar a célula de seu ambiente circundante, ocasião esta que provavelmente deu origem ao seu surgimento. Devido às suas funções de sustentação mecânica da célula, ambas estruturas biológicas merecem ser discutidas em maiores detalhes.

¹A palavra *célula* provém do latim *cella*, que quer dizer quarto pequeno. R. Hook assim as denominou pois elas o lembravam das *celas* (aposentos) de monges. Na verdade, o que ele observou foram estruturas hexagonais de paredes celulares de células vegetais mortas.

Figura 1.1: Célula eucariótica animal. 1. Nucléolo; 2. Núcleo celular; 3. Ribossomos; 4. Vesícula; 5. Retículo endoplasmático rugoso; 6. Complexo de Golgi; 7. Citoesqueleto; 8. Retículo endoplasmático liso; 9. Mitocôndria; 10. Vacúolo; 11. Citoplasma; 12. Lisossomo; 13. Centrossoma; 14. Membrana plasmática (ou membrana celular) e 15. Peroxissoma (ausente na figura). Figura disponível em: <http://pt.wikipedia.org/wiki/C%C3%A9lula> – acessada em 4 de agosto de 2014.

O citoesqueleto é essencialmente uma estrutura filamentosa que em eucariontes é constituído de microfilamentos, filamentos intermediários e microtúbulos. Nas células procarióticas, porém, foi descoberto somente na década de 90 (Bi & Lutkenhaus, 1991). Não obstante, tal estrutura é homóloga em todas as células² (Michie & Löwe, 2006) e sua existência viabiliza a motilidade celular por auto-deformação. O citoesqueleto é também uma das matrizes estruturais de *paredes celulares*³ e atua ainda como um autêntico trilho de transporte de organelas e substâncias.

À membrana celular delega-se um papel tão importante como o do citoesqueleto: delimitar a fronteira da célula. É formada por várias proteínas, glicídeos e canais iônicos, mas sobretudo, de uma dupla camada de fosfolípidios⁴ de 10 nanômetros (Alberts *et al.* (2009), Figura 1.2). Vesículas⁵, lisossomos, mitocôndrias e cloroplastos também são, em última instância, bicamadas lipídicas. Exagero não é, portanto, considerá-la como a matriz estrutural de todas as células biológicas.

²Homologia provém do grego *homos* – igualmente, e *logos* – ciência, razão. No contexto biológico, refere-se à origem ancestral comum.

³A *parede* celular localiza-se no exterior imediato da *membrana plasmática* de células vegetais e bactérias, mas *inexiste* em células eucarióticas *animais*.

⁴Um fosfolípido é um tipo de molécula anfifílica, ou seja, que possui uma parte hidrofílica (cabeça dipolar) e outra parte hidrofóbica (duas caudas de cadeias carbônicas).

⁵Bicamada lipídica que se forma naturalmente durante os processos de excreção (exocitose), absorção (endocitose) e transporte de materiais no citoplasma, além de atuar como uma câmara para reações químicas intracelulares.

Figura 1.2: Membrana celular. Figura extraída de: http://pt.wikipedia.org/wiki/Membrana_plasm%C3%A1tica – acessada em 11 de junho de 2014.

Ao mesmo tempo em que são estruturas fundamentais de sustentação morfológica, o citoesqueleto e a membrana plasmática também permitem que as células adotem e se mol-dem à várias formas geométricas. Efetivamente, há processos fisiológicos nos quais a deformabilidade celular age como um verdadeiro indicador do bom funcionamento do organismo humano⁶. Tanto é, pois, que mínimas alterações morfo-celulares podem provocar diversas doenças (*e.g.*, anemias hemolíticas⁷) ou delas serem consequência (*e.g.*, malária).

De etiologia celular, a anemia falciforme⁸ caracteriza-se pela ocorrência de hemácias de excessiva rigidez mecânica em forma de foice⁹ (Figura 1.3). Outra anemia hemolítica é a esferocitose hereditária, no qual as hemácias (também chamadas *eritrócitos*) adquirem um formato esférico e tornam-se mais propensas a hemólise. Nessas e em muitas outras doenças hematológicas, perdas de deformabilidade celular geralmente se dão em decorrência de alterações de volume ou área superficial celular (Clark *et al.*, 1983). Especificamente, está comprovada a seguinte correlação entre patologias e alterações dos eritrócitos: estomatocitose (aumento de volume), xerocitose (diminuição de volume), anemia hemolítica autoimune (diminuição de área superficial). Por fim, há doenças que provocam alterações simultâneas de volume e área superficial: a piropoiquilocitose, por exemplo, e a própria esferocitose (Clark *et al.*, 1983).

⁶Um exemplo notável a esse respeito é a filtragem sanguínea promovida pelo baço, o qual será discutido mais adiante.

⁷O adjetivo *hemolítica* refere-se a hemólise (quebra anormal de hemácias) nos próprios vasos sanguíneos ou em outros locais corpóreos. Não possui causa nutricional; é de etiologia congênita ou adquirida.

⁸A palavra falciforme é de etimologia latina: *falci*-, foice e *-forme*, formato de.

⁹Embora seja de natureza genética, tal desordem resulta do destacamento do citoesqueleto da membrana plasmática devido à polimerização indesejada da hemoglobina.

Figura 1.3: Micrografia eletrônica de hemácias (a) bicôncavas “normais”, cujo diâmetro típico é de 8 μm (Lim *et al.*, 2002) e (b) falciformes. Figuras extraídas de: http://www.nisenet.org/catalog/media/scientific_image_-_human_red_blood_cells_sem e <http://www.anatomybox.com/wp-content/uploads/2012/08/sickle.jpg> – acessadas em 20 de junho de 2012.

Há situações ainda em que alterações morfo-mecânicas das células não são a causa de doenças, senão que delas são consequência. Nesse âmbito, a malária é o exemplo mais usual¹⁰. Nela, um dos estágios de desenvolvimento parasita chamado merozoíto adentra às hemácias visando nelas replicar-se. Tal invasão as tornam mecanicamente mais rígidas e aderentes. À primeira vista, isso acabaria sendo benéfico, pois essa rigidez excessiva as impede parcialmente de passar por fendas sub-micrométricas existentes no baço. Independentemente de gerar um efeito secundário de anemia (por causa da malária)¹¹, essa função primordial de filtragem sanguínea do baço só é possível porque as hemácias “normais” possuem um valor específico de rigidez.

Um outro fenômeno no qual a micromecânica celular desempenha um papel crítico é no fluxo de sangue através de veias de pequeníssimo calibre, 5 a 10 μm (Krause, 2005). Nesse, a grande deformabilidade das hemácias¹² é a responsável por permitir seu transpasse pelos capilares¹³. Bastaria que elas fossem pouco menos deformáveis e então o transporte capilar de oxigênio estaria comprometido.

Pelo particularmente exposto, de doenças hematológicas à filtragem do sangue, é possível notar o papel seminal que a mecânica celular possui na homeostase dos organismos vivos. Dada a extensão do tema, ateremo-nos a discutí-lo no nosso contexto, isto é, no subconjunto próprio dos *métodos computacionais*.

¹⁰A propósito, indivíduos com anemia falciforme são mais resistentes à malária do que pessoas sem a doença devido à própria desordem hemolítica causada pela própria doença falciforme.

¹¹Por ocasião da filtragem sanguínea realizada pelo baço, o então inevitável decréscimo da quantidade total de hemácias no sangue acaba por resultar em anemia.

¹²O diâmetro típico de uma hemácia é 8 μm (Lim *et al.*, 2002).

¹³Devido à limitação de espaço, elas o fazem deformando-se em forma de cápsula e dispondo-se em fila única no fluxo sanguíneo.

Pesquisas de ponta em biologia atualmente contam com métodos computacionais. Entre outros, o estado da arte em modelagem computacional tem justamente contribuído no entendimento do acoplamento mecânico entre a bicamada lipídica e o citoesqueleto. Isso tem se dado mais intensamente na biomecânica das hemácias, devido ao seu apelo à aplicações tais como as já supracitadas malária, anemia falciforme e esferocitose.

À mecânica das hémacias infectadas por malária, Aingaran *et al.* (2012) e Peng *et al.* (2013) contribuíram investigando alterações de deformabilidade celular. Além de experimentos biológicos, os autores contaram com métodos computacionais para modelagem tri-dimensional. Mais especificamente, simulações em elementos finitos foram utilizadas para investigar alterações na rigidez de hemácias hospedeiras durante as cinco fases de maturação dos gametócitos do *Plasmodium falciparum*. Características específicas de cada fase foram consideradas (geometria, módulo de rigidez da hemácia hospedeira, e as dimensões das fendas sub-micrométricas do baço e dos vasos capilares). Como resultado exclusivo das simulações (mas alimentadas com dados dos experimentos), foram preditos os estágios dos gametócitos que conseguiriam passar pelo baço e pelos capilares. À pressão fisiológica local (10 Pa), resultou que todos os gametócitos conseguiram atravessar até mesmo o menor vaso capilar (4.0 μm). Pelas fendas micrométricas do baço (1.5 a 2.0 μm), no entanto, somente aqueles em último estágio de maturação conseguiram passar de modo eficiente à pressão local de 15 Pa. Outras aplicações em modelos contínuos são investigadas por Byun *et al.* (2012) (anemia falciforme) e Peng *et al.* (2011) (esferocitose).

Não só para a célula como um todo, senão que no próprio entendimento da bicamada lipídica está presente uma frutífera relação entre biologia e matemática. Sobre essa sinergia afirma Cohen (2001): *A matemática é o próximo microscópio da biologia, só que melhor [que o microscópio]; a biologia é a próxima física da matemática, só que melhor [que a física]*¹⁴. Embora uma revolução matemática a tão alto nível ainda esteja longe de ser alcançada, fato é que a geometria diferencial clássica relaciona-se (Marques & Neves, 2014a)¹⁵ e até mesmo tem sido diretamente influenciada (Bernard *et al.*, 2014)¹⁶ pela mecanobiologia celular. Diversos métodos computacionais têm sido requisitados na área, motivando seu próprio desenvolvimento e evolução.

Mesmo que só do ponto de vista biomecânico, tratar apenas do comportamento das bases de sustentação celular ora descritas (a saber, a membrana plasmática e o citoesqueleto) nem sempre é suficiente para a modelagem completa de uma célula viva. Há de serem consideradas outras estruturas (*e.g.*, fluido intracelular e/ou exterior) e processos complemen-

¹⁴Tradução livre de *Mathematics Is Biology's Next Microscope, Only Better; Biology Is Mathematics' Next Physics, Only Better*.

¹⁵Trata-se do seminal artigo *Min-max theory and the Willmore Conjecture*, no qual o brasileiro Fernando Codá e o português André Neves demonstraram a conjectura de Willmore é verdadeira (Willmore, 1965) (*i.e.*, provaram qual é a superfície de gênero 1 cuja integral do quadrado da curvatura média é a menor possível. Voltaremos a isso mais a frente, quando os conceitos necessários ao entendimento da conjectura já tiverem sido abordados).

¹⁶*Spherocytosis and the Helfrich model*, sobretudo um artigo de geometria diferencial.

tares (e.g., dinâmicas de sinalização e adesão celular). Como aponta a revisão sumarizada na Tabela 1.1 é preciso ir além da visão da célula como uma estrutura composta apenas de membrana plasmática e citoesqueleto (conferir coluna “Componentes do modelo”). De encontro à isso, dadas as três últimas linhas da Tabela 1.1, fato é que a própria mecânica da membrana plasmática ainda não se faz presente em modelos de células tridimensionais. Ainda mais, sequer sua estrutura mais básica – a bicamada fosfolipídica – é totalmente compreendida do ponto de vista mecânico. Como uma superfície fluida, sua simulação computacional ainda está por ser estabelecida, e nessa lacuna se situa o cerne desta tese.

Primeiramente, e de modo natural, há a escala física de interesse. Uma célula tem tamanho micrométrico e assim o emprego da dinâmica molecular faz-se de difícil justificativa¹⁷ (Ramakrishnan *et al.*, 2014), apresentando custo computacional que escala com a sexta potência da estrutura física a ser resolvida (Arroyo *et al.*, 2010). Além disso, a dinâmica de bicamadas lipídicas se dá em tempos característicos da ordem de milissegundos, o que definitivamente exige uma abordagem de mecânica dos meios contínuos.

Ainda no que se refere à simulação de membranas viscosas, há a constituição material da bicamada. Embora os lipídios sejam atualmente uma obviedade como principal constituinte das membranas celulares, nem sempre assim o foram. De fato, essa era uma questão elusiva até o início da década de 70, enquanto que a estrutura do ADN (ácido-desoxorribonucleico) fora desvendada quase 20 anos antes (Watson & Crick, 1953). A dúvida final remanescente era se a base estrutural da membrana celular era lipídica ou protéica¹⁸. A resposta definitiva favorável aos lipídios foi dada por Singer & Nicolson (1972), por ocasião de seu *modelo mosaico fluido*. Anteriormente, no entanto, Singer já houvera descoberto que a forma de mosaico era o único modelo consistente com restrições termodinâmicas e dados experimentais da época¹⁹ (Singer, 1971).

Nos dias de hoje, 40 anos após a proposta de Singer & Nicolson (1972), seria de se esperar que o modelo mosaico fluido necessitasse de uma extensiva revisão. De fato, ao contrário do que se espera de um fluido bidimensional puramente lipídico, atualmente se sabe que muitas proteínas integrais de membrana²⁰ não se movimentam exclusivamente por difusão²¹.

¹⁷O custo computacional requerido em dinâmica molecular atômica limita a resolução de estruturas atômicas até a escala nanométrica. Em métodos *coarse-grained* não há representação de todos os átomos. Neles, as interações atômicas são modeladas por potenciais efetivos, os quais também não a justificam como mais realista ou de primeiros princípios do que a abordagem do *continuum*. A propósito, Müller *et al.* (2006) discutem o papel alternativo de métodos *coarse grained* na investigação de membranas lipídicas quanto à sua estrutura e termodinâmica.

¹⁸Parafraseando Singer & Nicolson (1972): *lipídios ou proteínas: qual é a argamassa, qual é o tijolo?*

¹⁹A faixa de temperatura de transição de fase era praticamente a mesma para as membranas plasmáticas de bactérias *Mycoplasma* e para os lipídios extraídos de tais membranas.

²⁰Proteínas integrais de membrana fazem parte da categoria de proteínas transmembranares; um exemplar das últimas aparece em destaque na Figura 1.2.

²¹Modos de transporte lateral sobre a superfície celular incluem ainda: (a) confinamento transiente provocado por obstáculos clusterizados; (b) confinamento transiente causado por estruturas de junção membrana-citoesqueleto; (c) movimento direto – quando a proteína integral está diretamente ligada ao citoesqueleto (Jacobson *et al.*, 1995). Outras classificações ligeiramente diferentes também são possíveis (Hai-Tao & Marguet, 2011).

Tabela 1.1: Métodos computacionais para estudo de forma e motilidade de células eucarióticas. Componentes do modelo: dinâmica do citoesqueleto (DC), escoamento do fluido intracelular (EI), dinâmica de sinalização celular (DS), mecânica da membrana plasmática (MM) e dinâmica de adesão celular (DA). Tratamento numérico da interface: *level set* (LS), partículas lagrangianas (PL), campo de fase (CF), modelo de Potts celular (MP) e fronteira imersa (FI). Discretização: método das diferenças finitas (MDF), método dos volumes finitos (MVF) e método dos elementos finitos (MEF). Tabela adaptada de Holmes & Edelstein-Keshet (2012).

Geometria	Referência	Componentes do modelo					Método computacional	
		DC	EI	DS	MM	DA	Interface	Discretização
1D	Neilson <i>et al.</i> (2011)			×	×		LS	MEF
	Hecht <i>et al.</i> (2011)			×	×		PL	MDF
	Kabaso <i>et al.</i> (2011)	×			×	×	PL	MDF
	Stéphanou <i>et al.</i> (2008)	×			×	×	PL	MDF
	Bottino <i>et al.</i> (2002)	×					PL	MDF
2D	Herant <i>et al.</i> (2003)	×	×				PL	MEF
	Dobrovinski & Kruse (2011)	×		×	×		PL	MDF
	Rubinstein <i>et al.</i> (2005)	×				×	PL	MEF
	Rubinstein <i>et al.</i> (2009)	×				×	–	MEF
	Wolgemuth <i>et al.</i> (2010)		×	×		×	LS	MVF
	Wolgemuth & Zajac (2010)		×	×		×	LS	MVF
	Shao <i>et al.</i> (2010, 2012)	×		×	×	×	CF	MDF
	Vanderlei <i>et al.</i> (2011)		×	×	×		PL	MDF
	Marée <i>et al.</i> (2006, 2012)	×		×	×	×	MP	MDF
	Kuusela & Alt (2009)	×	×			×	LS	MDF/MVF/MEF
	Rahimi & Arroyo (2012)				×		PL	MEF
	Heintz (2015)		×		×		FI	MEF
	Barrett <i>et al.</i> (2015)		×		×		PL	MEF
	Novak <i>et al.</i> (2008)	×					–	MVF
3D	Ditlev <i>et al.</i> (2009)	×					–	MVF
	Herant <i>et al.</i> (2003)	×	×			×	PL	MEF
	Tasso & Buscaglia (2013)				×		PL	MDF/MEF

Não obstante, o modelo mosaico fluido ainda permanece relevante para o entendimento de membranas biológicas por ainda produzir previsões em ótima concordância com resultados experimentais (Nicolson, 2014).

1.2. Modelagem física

Como um meio contínuo, as bicamadas lipídicas possuem rigidez à flexão em sua direção normal (como um *sólido*), mas tangencialmente se comportam como um *fluido* – newtoniano, de fato (Harland *et al.*, 2010, 2011). Sua viscosidade *superficial* típica²² é da ordem de $5 - 13 \times 10^{-9}$ Pa·s·m (Waugh, 1982b), podendo ultrapassar 2×10^{-6} Pa·s·m. Quando em estrutura de bicamada, os fosfolipídios têm alta mobilidade *tangencial*, mas somente nessa direção. Raramente uma molécula lipídica transpassa de uma camada lipídica à outra²³, pois, ao fazê-lo, sua cabeça dipolar tem que passar através das caudas apolares das moléculas vizinhas. Por sinal, no que se refere à cargas elétricas, as moléculas fosfolipídicas oriundas de membranas celulares são feitas principalmente de fosfatidilcolina (Alberts *et al.*, 2009), isto é, de $C_{42}H_{82}NO_8P$, um composto eletricamente neutro, mas zwitteriônico²⁴. Essa neutralidade de carga nos permite negligenciar fenômenos de natureza eletromagnética (ao menos em primeira instância).

Em contrapartida àquelas naturalmente presentes na estrutura de células vivas, as bicamadas lipídicas também podem ser sintetizadas em laboratório, inclusive para formar vesículas artificiais denominadas *lipossomas* (Sessa & Weissmann, 1968). Sua representação pictórica é exibida na Figura 1.4. Os lipossomas são o modelo experimental mais simples de membranas celulares. Não por isso deixam de interagir diretamente com células vivas e suscitar uma vasta gama de aplicações (Alberts *et al.*, 2009; Santos & Castanho, 2002). Uma delas é atuar como envoltório bioquímico de vetorização de drogas, transportando-as de modo intacto até uma célula ou organela, quando por contato com o alvo desejado o lipossoma se abre e libera o fármaco (Torchilin, 2005). Ora revelada sua importância tanto para a pesquisa básica como para aplicações, consideraremos o lipossoma como nosso modelo de estudo de membranas celulares.

No que diz respeito à mecânica de membranas lipídicas, não somente suas propriedades materiais importam, senão que seu meio circundante também é relevante. Primeiro porque o ambiente é o que propicia o efeito hidrofóbico, por sua vez responsável tanto pela formação de membranas celulares como dos lipossomas. Também como fruto do ambiente, membranas lipídicas fechadas possuem valores fixos de área superficial e volume interior. Uma descrição completa a esse respeito é apresentada por Seifert (1997), cujas ideias integram a base dos dois parágrafos a seguir.

A conservação de volume decorre do fato de a pressão osmótica ambiente geralmente ser nula. Membranas lipídicas são permeáveis a água, mas impermeáveis a moléculas relati-

²²A viscosidade das membranas lipídicas surge da fricção das moléculas anfifílicas quando estas se reorganizam para acomodar as mudanças morfológicas que as bicamadas lipídicas experimentam.

²³Estima-se que a frequência de ocorrência de um *flip-flop* seja de menos de uma vez a cada 30 dias para cada molécula lipídica individual (Alberts *et al.*, 2009).

²⁴Zwitteriônico: composto químico eletricamente neutro, mas que possui cargas elétricas opostas em diferentes átomos.

Figura 1.4: Dupla camada lipídica e abaixo um lipossoma visto em corte. Acima, uma vista em detalhe mostrando uma molécula fosfolipídica, com cabeça dipolar e as duas respectivas cadeias de hidrocarbonetos. Quando introduzidos em ambiente aquoso (e se em concentração suficientemente alta), por causa do efeito hidrofóbico, os fosfolípidos agregam espontaneamente em duas camadas monomoleculares formando os lipossomas. Figura extraída de: <http://astrobiology.nasa.gov/nai/library-of-resources/annual-reports/2006/ciw/projects/project-4-prebiotic-molecular-selection-and-organization> – acessada em 9 de abril de 2012.

vamente grandes como íons e açúcares. Tais moléculas, por sua vez, estão sempre presentes na solução ambiente (ou deliberadamente, ou por impurezas). Isso implica que diferentes concentrações dessas moléculas entre os meios interior e exterior tem que ser balanceadas por meio de um processo osmótico. Ocorre que o surgimento espontâneo de pressões osmóticas não pode ser facilmente contrabalanceado pelas forças que advêm da rigidez de curvatura membranal, pois esta é comparativamente mais fraca. Assim, o volume interior de um lipossoma adquire um certo valor fixo de modo que a pressão osmótica através da membrana seja zero²⁵. Em aplicações médicas, essa sensibilidade à pressão osmótica é utilizada de modo peculiar em testes diagnósticos de doenças hematológicas. Particularmente, uma quantidade chamada *fragilidade osmótica*²⁶ revela-se aumentada na esferocitose hereditária, e aquém do esperado no caso da anemia falciforme (Means Jr. & Glader, 2009).

Ademais, o ambiente exerce sobre as membranas lipídicas um outro papel que às vezes passa despercebido. As bicamadas lipídicas possuem a área superficial constante²⁷ quando a temperatura ambiente está fixa e quando não há moléculas lipídicas no ambiente dispo-

²⁵Qualquer mudança nas condições osmóticas ambientes leva a uma adaptação do volume interior de modo que a pressão osmótica resultante se anule novamente; caso contrário, a célula ou lipossoma se rompe.

²⁶Porcentagem de hemólise que ocorre quando uma amostra de hemácias se sujeita a um estresse osmótico gerado por uma solução hipotônica.

²⁷A temperatura fixa, mesmo sob forças externas, permanece inalterada a distância entre as moléculas lipídicas. Sua extensão ou compressão envolve um custo energético muito maior do que sua flexão.

níveis para absorção. Experimentalmente, a máxima expansão de área é estimada em 2% (Staykova *et al.*, 2011).

Por fim, a própria dinâmica do fluido ambiente – aquoso, via de regra – também deve ser descrita. Tem-se aí uma interação fluido-estrutura, que embora já conte com alguns estudos (Salac & Miksis, 2011; Bonito *et al.*, 2010), ainda carece de investigações em se tratando de modelos de membranas *viscosas*. De fato, a menos da estratégia de Tasso & Buscaglia (2013) de se aproximar o operador viscoso através do operador elástico (Massey & Ward-Smith, 1998; Maude, 1957), vamos aqui introduzir o primeiro método numérico capaz de simular a mecânica computacional de membranas viscosas, porém, como entes *fluidos*²⁸. Segundo nos consta, uma exceção valiosa é o estudo de Arroyo & DeSimone (2009), mas no qual os autores contemplam apenas lipossomas com simetria axial. Para geometrias arbitrárias, a viscosidade superficial é realmente considerada ao se resolver o operador de Stokes sobre a membrana, *i.e.*, sobre um domínio móvel *não-euclidiano*. Antes disso, porém, vejamos uma primeira descrição matemática do problema central dessa tese.

1.2.1. Mecânica de interfaces imersas em fluidos

Ao pensarmos em uma abordagem de elementos finitos, nosso ponto de partida natural é o princípio das potências virtuais. Para o sistema fluido-interface de interesse, *a potência virtual das tensões dissipativas somada a potência virtual das acelerações é igual a taxa de liberação de energia elástica mais a potência virtual das forças aplicadas sobre a membrana e sobre o fluido ambiente*. Assim, para uma superfície membranal Γ imersa em um fluido ambiente Ω (por abuso, omitimos os diferenciais dos domínios de integração²⁹)

$$\mathfrak{D}_{\Gamma}(\mathbf{v}) + \int_{\Omega} \rho_B \mathbf{a} \cdot \mathbf{v} = -d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) + \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} + \int_{\Omega} \rho_B \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \quad \forall \mathbf{v} \in V(\Gamma), \quad (1.1)$$

em que $V(\Gamma)$ é o espaço de velocidades superficiais admissíveis; $\mathbf{v}$ é um campo de velocidade virtual; $\mathfrak{D}_{\Gamma}(\mathbf{v})$ é o funcional de dissipação; ρ_B e $\mathbf{a}$ são respectivamente a massa específica e aceleração do fluido ambiente (*bulk fluid*); $\mathcal{E}(\Gamma)$ é a energia membranal configuracional, cuja derivada de forma é denotada por $d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v})$; $\mathbf{f}$ é uma densidade superficial de força aplicada sobre Γ e o produto $\rho_B \mathbf{b}$ representa uma força externa (por unidade de volume) aplicada sobre o fluido ambiente. A ausência de um termo inercial membranal se deve ao fato do número de Reynolds característico de um escoamento membranal típico: 2.5×10^{-9} (conforme disposto na Tabela 4.1). Em (1.1), apesar do fluido ambiente apresentar-se em $\mathfrak{D}_{\Gamma}(\mathbf{v})$ e nos termos em que ρ_B participa, em nossa modelagem ele será apenas considerado como uma força de pressão exercida sobre a bicamada lipídica (o foco da tese é a mecânica interfacial).

²⁸Na fase final de desenvolvimento da tese, surgiram os trabalhos de Heintz (2015) e Barrett *et al.* (2015), mas estes apareceram posteriormente ao depósito de nosso artigo no arXiv (Rodrigues *et al.*, 2014).

²⁹Daqui por diante, nos reservaremos o direito de frequentemente fazê-lo quando uma notação mais sucinta for necessária.

Como a superfície Γ dissipa energia? Como ela a armazena? A resposta à essas questões será dada ao definirmos $\mathfrak{D}_\Gamma(\mathbf{v})$ e $\mathcal{E}(\Gamma)$. Por ora, $\mathfrak{D}_\Gamma(\mathbf{v})$ refere-se à *dissipação viscosa*, enquanto que $\mathcal{E}(\Gamma)$ é um tipo específico de energia de *flexão*, ambas relativas à membrana. Nessa perspectiva, motivados a entender a mecânica da interface de uma célula viva, nossa contribuição se dá no tratamento numérico do operador viscoso no contexto interfacial (operador de Boussinesq-Scriven) acoplado ao modelo elástico de Canham-Helfrich.

A seguir, uma visão geral sobre os próximos capítulos da tese.

O Capítulo 2 se devota à formulações de elementos finitos em problemas viscosos. Iniciamos discutindo o problema de (Navier-)Stokes em domínios de solução euclidianos, até chegarmos aos domínios curvos (variedades), em elementos finitos superficiais (Dziuk & Elliott, 2013). Como em domínios euclidianos é que se situam os primórdios dos elementos finitos (Ern & Guermond, 2004; Ciarlet, 1978), por ele iniciamos, aproveitando inclusive para enunciar alguns detalhes e ingredientes necessários ao método numérico proposto no Capítulo 4. Ainda no Capítulo 2, sem delongas, aproveitamos para reportar alguns resultados originais de um novo espaço de elementos finitos para velocidade-pressão proposto por Buscaglia & Ruas (2014). Alertamos que esse último é um tópico marginal, do qual o leitor exclusivamente interessado em membranas lipídicas pode se abster sem prejuízo.

O Capítulo 3 é uma revisão e discussão sobre energia configuracional de superfícies (discretas, inclusive). Nele, há aspectos puramente físicos e de modelagem aplicada à membranas biológicas, embora nosso objetivo final seja discutir como a energia configuracional varia com respeito à alterações de forma. Como candidata unânime à modelagem, utilizamos a clássica energia de Willmore da geometria diferencial – no contexto de membranas biológicas, tal energia é atribuída à Canham e à Helfrich (Canham, 1970; Helfrich, 1973).

O Capítulo 4 é o cerne da tese, onde finalmente apresentamos nosso método de elementos finitos para membranas viscosas fechadas e com rigidez de curvatura. As incógnitas são a velocidade, o vetor curvatura e a pressão superficial, todas estas interpoladas com elementos finitos lineares contínuos. Extensivos experimentos numéricos de dinâmica de relaxação são apresentados e comparados com soluções quasi-analíticas. Ainda, reportamos a convergência e os limites de estabilidade de nosso método e sua habilidade em prever corretamente o equilíbrio dinâmico de compridas e finas elongações cilíndricas (*tethers*) que surgem do pinçamento membranal. Testes adicionais ilustram a robustez do método e a relevância dos efeitos viscosos na membrana quando sob a ação de forças externas.

O Capítulo 5 é construído como uma primeira resposta à seguinte generalização física e matemática: e as membranas viscosas *abertas*? De fato, sua existência não é uma situação hipotética. Para além das bicamadas lipídicas *abertas*, há a forma discoidal do colesterol HDL (*High-Density-Lipoprotein*), que além de ser uma bicamada lipídica discóide possui ainda uma (apolipo-)proteína ligada a sua borda.

No Capítulo 6 compilamos os principais resultados da tese, apresentamos perspectivas futuras e considerações finais.

There is only one item which is worth learning, and that is the simple definition of viscosity which we will come to in a moment. The rest is only for your entertainment.

Richard P. Feynman, *The Feynman Lectures on Physics*

Capítulo

2

Formulações de elementos finitos para escoamentos viscosos em domínios euclidianos e curvos

Esse capítulo é dedicado à viscosidade e ao método dos elementos finitos (superficiais, inclusive). Além de generalidades, destacam-se em especial as formulações estabilizadas e os elementos finitos superficiais. A partir da analogia com um domínio de solução euclidiano, introduzimos ao final uma primeira formulação de elementos finitos para escoamentos viscosos em domínios curvos.

2.1. Equações governantes e abordagem numérica

Seja $\Omega \in \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ ou 3) um domínio aberto e limitado com fronteira $\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2$, $\partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2 = \emptyset$, no qual há um escoamento incompressível de um fluido newtoniano. À ele, segundo as equações de Navier-Stokes

$$\begin{aligned}
 \text{(NS-EDP)} \left\{ \begin{aligned} \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \nabla \cdot (2\mu D\mathbf{u}) + \nabla p &= \rho \mathbf{b} & \text{em } \Omega, & t > 0, & (2.1) \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 & \text{em } \Omega, & t > 0, & (2.2) \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}_{\partial\Omega_1} & \text{em } \partial\Omega_1, & t > 0, & (2.3) \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\mathbf{n}} &= \mathbf{0} & \text{em } \partial\Omega_2, & t > 0, & (2.4) \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}^0 & \text{em } \Omega, & t = 0, & (2.5) \end{aligned} \right.
 \end{aligned}$$

em que $D\mathbf{u}/Dt$ é a aceleração convectiva, $D\mathbf{u} \doteq \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)$ é o gradiente simétrico do campo de velocidade, $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbb{I} + 2\mu D\mathbf{u}$ é o tensor das tensões, $\rho\mathbf{b}$ é uma força externa por

unidade de volume, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ é a restrição de incompressibilidade, $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\partial\Omega_1}$ é uma condição de contorno Dirichlet em $\partial\Omega_1$, $\boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\mathbf{n}} = \mathbf{0}$ é uma condição de contorno Neumann homogênea em $\partial\Omega_2$, $\tilde{\mathbf{n}}$ é a normal exterior à $\partial\Omega$ e $\mathbf{u}^0$ é a condição inicial para o campo de velocidade. Há ainda a derivada material clássica, que ao operar sobre uma certa função $\mathcal{Z}$ (escalar ou vetorial) produz

$$\frac{D\mathcal{Z}}{Dt} \doteq \frac{\partial\mathcal{Z}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathcal{Z}. \quad (2.6)$$

O acrônimo NS-EDP se refere às equações de Navier-Stokes.

2.1.1. Formulação variacional

Na forma fraca, ao definir

$$V \doteq \left\{ \mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^d ; \mathbf{v} = \mathbf{u}_{\partial\Omega_1} \text{ em } \partial\Omega_1 \right\} \quad (2.7)$$

$$\mathring{V} \doteq \left\{ \mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^d ; \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ em } \partial\Omega_1 \right\} \quad (2.8)$$

$$Q \doteq L^2(\Omega) \quad (2.9)$$

a formulação variacional equivalente à (NS-EDP) é

Para $t > 0$, encontrar $(\mathbf{u}(t), p(t)) \in V \times Q$ tal que

$$\left. \begin{aligned} & \int_{\Omega} \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Omega} 2\mu D\mathbf{u} : D\mathbf{v} d\Omega - \\ & - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Omega} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \in \mathring{V} \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} d\Omega = 0 \quad \forall q \in Q. \quad (2.11)$$

Uma formulação variacional discreta

A discretização espacial é baseada numa malha conforme de elementos finitos $\mathcal{T}_h$, a partir da qual são definidos $V_h \subset V$ (e seu homogêneo $\mathring{V}_h \subset \mathring{V}$) e $Q_h \subset Q$. À eles, uma vasta gama de possibilidades: os espaços em si, os graus de liberdade de cada elemento, a opção ou não pelos chamados métodos estabilizados, etc.

Dado um problema de interesse, deliberar por um ou outro método de elementos finitos nem sempre é tarefa fácil. Alguns aspectos podem fornecer direções, no entanto. Os mais importantes talvez sejam a regularidade esperada/exigida para a solução e o caráter elíp-

tico da equação ou sistema de equações a ser resolvido. Mesmo em se tratando somente de fluidos newtonianos, as situações físicas são diversas: a pressão pode ser ou não contínua, termos advectivos inerciais podem ser fortemente dominantes, etc. Não pretendemos esgotar o assunto, mas apenas apresentar uma formulação variacional discreta um tanto quanto geral. Ela é formulada para espaços *contínuos* cuja ordem de aproximação de velocidade e de pressão definem a necessidade ou não de estabilização.

O elemento finito P_2/P_1 de Taylor-Hood satisfaz a estimativa ótima de erro na formulação de Galerkin, dispensando o uso de formulações estabilizadas. Isto se deve ao fato de ele satisfazer a chamada condição inf-sup (ou de Babuška-Brezzi)¹:

$$\inf_{q_h \in Q_h} \sup_{\mathbf{w}_h \in \dot{V}_h} \left\{ \frac{1}{\|\mathbf{w}_h\|_V \|q_h\|_Q} \int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \mathbf{w}_h \, d\Omega \right\} \geq \beta > 0, \quad (2.12)$$

em que β é uma constante independente da malha. Tal desigualdade não é satisfeita por elementos nos quais a velocidade e a pressão são interpoladas com a mesma ordem (Ern & Guermond, 2004) e à esses casos é que as formulações estabilizadas são de especial interesse. Na formulação de Galerkin, por outro lado, os únicos elementos simpliciais de segunda ordem que satisfazem a condição (2.12) são o P_2/P_1 de Taylor-Hood (ver Brenner & Scott (2008), por exemplo) e o P_2^+/P_1^{disc} de Crouzeix-Raviart. Oportunamente, na Seção 2.2 um terceiro elemento finito será acrescentado à essa lista.

Uma formulação variacional discreta no espaço e no tempo associada a (NS-FV) é:

Encontrar $(\mathbf{u}_h^{n+1}, p_h^{n+1}) \in V_h \times Q_h$ tal que

$$(\text{NS-FVD}) \left\{ \begin{aligned} \mathcal{R}_{\mathbf{u}} &\doteq \int_{\Omega} \mathcal{G}_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{v}_h \, d\Omega + \int_{\Omega} 2\mu D\mathbf{u}_h^{n+\theta} : \nabla \mathbf{v}_h \, d\Omega - \int_{\Omega} p_h^{n+\theta} \nabla \cdot \mathbf{v}_h \, d\Omega + \\ &+ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{\tau_{K_u}}{\rho} \int_K \mathbf{r}_{\mathbf{u}} \cdot \left(\rho (\mathbf{u}_h^{n+\theta} \cdot \nabla) \mathbf{v}_h + \Lambda \mu \nabla^2 \mathbf{v}_h \right) d\Omega_K = 0 \quad \forall \mathbf{v}_h \in \dot{V}_h \end{aligned} \right. \quad (2.13)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \mathcal{R}_p &\doteq \int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+1} \, d\Omega + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{\tau_{K_p}}{\rho} \int_K \mathbf{r}_p \cdot \nabla q_h \, d\Omega_K = 0 \quad \forall q_h \in Q_h, \end{aligned} \right. \quad (2.14)$$

em que

$$\mathcal{G}_{\mathbf{u}} \doteq \rho \left(\frac{\mathbf{u}_h^{n+1} - \mathbf{u}_h^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}_h^{n+\theta} \cdot \nabla) \mathbf{u}_h^{n+\theta} - \mathbf{b}^{n+\theta} \right), \quad (2.15)$$

$$\mathbf{u}_h^{n+\theta} \doteq \theta \mathbf{u}_h^{n+1} + (1 - \theta) \mathbf{u}_h^n, \quad (2.16)$$

$$p_h^{n+\theta} \doteq \theta p_h^{n+1} + (1 - \theta) p_h^n, \quad (2.17)$$

¹Conferir, por exemplo, Brezzi & Fortin (1991) ou Boffi *et al.* (2008).

e de maneira análoga para $\nabla p_h^{n+\theta}$.

Escolhas distintas para $\mathbf{r}_u$ e $\mathbf{r}_p$ resultam em diferentes métodos de estabilização. Também há várias possibilidades de escolha para os parâmetros τ_{K_u} e τ_{K_p} . Não obstante, nós os definiremos de modo único mais à frente.

Diremos agora algumas palavras sobre sua convergência. Em nome da simplicidade, trataremos do caso no qual a velocidade possui condição de contorno Dirichlet *homogênea* em toda a fronteira $d\Omega$, sendo então a solução pertencente ao espaço $\mathring{V}_h \doteq \{\mathbf{v}_h \in V_h \subset H^1(\Omega)^d; \mathbf{v}_h = \mathbf{0}\}$. Assim sendo, o espaço teste de pressões tem que ser redefinido pois $Q_h \subset Q \doteq L^2(\Omega)$ contém todas as funções constantes e a pressão fica indeterminada. Para tanto, basta redefiní-lo como

$$M_h \doteq Q_h \cap L_0^2 = \left\{ q_h \in Q_h; \int_{\Omega} q_h d\Omega = 0 \right\}. \quad (2.18)$$

Os espaços contínuos e os discretos relacionam-se por meio das hipóteses a seguir.

Hipótese 2.1.1. (*Propriedade de aproximação de V_h*). Existem um operador $\mathcal{R}_h \in \mathcal{L}(H^2(\Omega)^d; V_h) \cap \mathcal{L}((H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega))^d; \mathring{V}_h)$ e um inteiro l tal que

$$\|\mathbf{v} - \mathcal{R}_h \mathbf{v}\|_{1,\Omega} \leq C h^m \|\mathbf{v}\|_{m+1,\Omega} \quad \forall \mathbf{v} \in H^{m+1}(\Omega)^d, \quad 1 \leq m \leq l. \quad (2.19)$$

Hipótese 2.1.2. (*Propriedade de aproximação de Q_h*). Existem um operador $\mathcal{S}_h \in \mathcal{L}(L^2(\Omega); Q_h)$ e um inteiro l tal que

$$\|q - \mathcal{S}_h q\|_{0,\Omega} \leq C h^m \|q\|_{m,\Omega} \quad \forall q \in H^m(\Omega), \quad 0 \leq m \leq l. \quad (2.20)$$

Hipótese 2.1.3. (*Condição inf-sup uniforme*). Para cada $q_h \in M_h$ existe um $\mathbf{v}_h \in \mathring{V}_h$ tal que

$$\int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \mathbf{v}_h d\Omega = \|q_h\|_{0,\Omega}^2 \quad (2.21)$$

$$\|\mathbf{v}_h\|_{1,\Omega} \leq C \|q_h\|_{0,\Omega}. \quad (2.22)$$

Teorema 2.1.4. *Sob as hipóteses 2.1.1, 2.1.2 e 2.1.3, o problema dado por (NS-FVD) tem solução única $(\mathbf{u}_h, p_h) \in V_h \times M_h$ e $(\mathbf{u}_h, p_h)$ tende a solução de (NS-FVD) pois*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left\{ \|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}\|_{1,\Omega} + \|p_h - p\|_{0,\Omega} \right\} = 0. \quad (2.23)$$

Ademais, quando $(\mathbf{u}, p) \in H^{m+1}(\Omega)^d \times (H^m \Omega \cap L_0^2(\Omega))$ para algum inteiro m , $1 \leq m \leq l$, vale o seguinte limitador de erro:

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{1,\Omega} + \|p - p_h\|_{0,\Omega} \leq C h^m \left\{ \|\mathbf{u}\|_{m+1,\Omega} + \|p\|_{m,\Omega} \right\}. \quad (2.24)$$

Demonstração. Ver (Girault & Raviart, 1986), pág. 125. ■

Estabilização quando $\mathbf{r}_u$ e $\mathbf{r}_p$ são o resíduo da equação de momento

Explicitamente, referimo-nos ao caso em que

$$\mathbf{r}_u = \mathbf{r}_p = \left(\mathcal{G}_u - \nabla \cdot (2\mu D\mathbf{u}_h^{n+\theta}) + \nabla p_h^{n+\theta} \right), \quad (2.25)$$

O valor da constante Λ em (2.13) corresponde às seguintes opções: método variacional multiescala algébrico (ASGS)²: $\Lambda = +1$ (Hughes *et al.*, 1998; Codina, 2002, 2000); método Galerkin-*Least-Squares* (GLS): $\Lambda = -1$ (Franca & Hughes, 1993); ou $\Lambda = 0$, às vezes também utilizado por alguns autores (Tezduyar *et al.*, 1992).

Estabilização por projeção do gradiente de pressão (SPGP)

A estabilização por projeção do gradiente de pressão consiste essencialmente em adicionar à equação da incompressibilidade a divergência da diferença entre o gradiente de pressão e a sua projeção em V_h . Portanto, diz respeito somente à estabilização em $\mathcal{R}_p$. Quando a equação de momento também carecer de estabilização – ou seja, quando houver alguma dominância advectiva, (2.14) pode ou não ser estabilizada via projeção do gradiente de pressão. Na escolha dada por (2.25), por exemplo, ela não é adotada.

O método SPGP³ foi proposto por Codina (Codina & Blasco, 1997; Buscaglia *et al.*, 2000; Codina *et al.*, 2001) e desenvolvido especialmente para que a velocidade e a pressão possam ser interpoladas com igual ordem, sem modos espúrios de pressão e recuperando a *div-estabilidade*. Nele, $\mathbf{r}_p$ é dado por

$$\mathbf{r}_p = \nabla p_h^{n+1} - \mathbf{g}_h^{n+\beta}, \quad (2.26)$$

em que $\mathbf{g}_h^{n+\beta}$ é a projeção $L^2(\Omega)$ de $\nabla p_h^{n+\beta}$ em V_h , com $\beta \in \{0, 1\}$. Se $\beta = 1$ o acoplamento com a projeção do gradiente de pressão é tratada de modo implícito, enquanto que $\beta = 0$ corresponde a um tratamento explícito. Seja como for,

$$\int_{\Omega} (\nabla p_h^{n+\beta} - \mathbf{g}_h^{n+\beta}) \cdot \mathbf{w}_h d\Omega = 0, \quad \forall \mathbf{w}_h \in V_h, \quad (2.27)$$

pois $\nabla p_h^{n+\beta} - \mathbf{g}_h^{n+\beta} \perp V_h$ justamente pela ortogonalidade. No caso implícito ($\beta = 1$), $\mathbf{g}_h^{n+\beta}|_{\beta=1}$ requerido em (2.26) tem que ser computado por intermédio de (2.27) ao mesmo tempo em que (NS-FVD) está sendo resolvido já que $\nabla p_h^{n+\beta}|_{\beta=1}$ também é incógnita em (2.27). Isso adiciona mais três incógnitas *por nó* ao sistema a ser resolvido. Há como contornar esse problema, mas somente em regime estacionário (Codina *et al.*, 2001). No caso explícito ($\beta = 0$), $\mathbf{g}_h^{n+\beta}|_{\beta=0}$ de (2.26) é computado *separadamente* em (2.27), pois nesse caso $\nabla p_h^{n+\beta}|_{\beta=0}$ é conhecido. Seja como for, o importante é estabilizar a solução mantendo-se o gradiente

²Acrônimo proveniente de *Algebraic SubGrid Scale* (method).

³*Stabilization by Pressure Gradient Projection*.

de pressão implícito em (2.26). Em todo caso, no método SPGP a projeção $\mathbf{g}_h^{n+\beta}$ torna-se também uma incógnita, e o sistema dado por (2.13) e (2.14) deve ser completado com a equação (2.27) e resolvido também para $\mathbf{g}^{n+\beta}$.

Como já comentamos, o método SPGP será particularmente útil na nossa formulação discreta para membranas, dada nossa opção de utilizar apenas malhas de *triângulos lineares* para todos os campos incógnitas (velocidade, pressão superficial e vetor curvatura).

Seja qual for o método de estabilização, SPGP, ASGS ou outro, as estabilizações de velocidade (τ_{K_u}) e de pressão (τ_{K_p}) podem ter pesos distintos. A despeito disso, definiremos

$$\tau_{K_u} \doteq c_\tau \left(\frac{4\mu}{\rho h_K^2} + \frac{2\|\mathbf{u}_h^n\|_\infty}{h_K} \right)^{-1} \doteq \tau_{K_p}, \quad (2.28)$$

em que h_K é o tamanho característico do elemento K . Evidentemente, $c_\tau \equiv 0$ na formulação de Galerkin.

Para se resolver o sistema para velocidade-pressão monoliticamente (*i.e.*, de modo acoplado) há o método de Newton-Raphson. No entanto, no caso de fazê-lo para a formulação de Galerkin, faz-se necessária uma estratégia especial para evitar pivôs nulos na fatoração da matriz de iteração de Newton, a “penalização iterativa” proposta por Codina (1993). Sua ideia consiste na adição de uma pequena matriz de difusão no bloco pressão-pressão da matriz jacobiana, isto é,

$$\mathbb{J}^{jk} = \mathbb{M}^{jk} = \frac{\partial \mathcal{R}_p^j}{\partial P^k} + \epsilon \sum_{K \ni k} \int_{\Omega_K} \frac{h^2}{\mu} \nabla M^j \cdot \nabla M^k d\Omega_K, \quad (2.29)$$

em que P^k denota a incógnita de pressão, M é a função de base de pressão, h é o valor médio das arestas de todos os triângulos da malha e o parâmetro ϵ é o peso de penalização. Essa estratégia altera apenas a matriz de iteração, mas não modifica os resíduos $\mathcal{R}_p$ e $\mathcal{R}_u$. Assim, uma vez alcançada a convergência, a solução obtida satisfaz o sistema (NS-FVD).

Na sequência, alguns resultados originais de novos espaços de elementos finitos para velocidade-pressão. Trata-se da Seção 2.2 a seguir, a qual pode ser prescindida pelo leitor interessado exclusivamente em problemas de mecânica de membranas.

2.2. Elemento de Zienkiewicz na aproximação da velocidade

O novo espaço trata-se de um elemento misto para escoamentos incompressíveis em formulação velocidade-pressão, proposto por Buscaglia & Ruas (2014), mas que até então fora somente empregado em problemas sem inércia, lineares. O elemento em questão interpola a velocidade com um elemento simplicial (em 2D, um triângulo) cujas interpolantes locais são polinômios de grau três (completos ou incompletos, dependendo do caso). É verdade que em outro contexto ele já fora originalmente desenvolvido por O. C. Zienkiewicz para a modelagem do campo de deslocamento de placas (Zienkiewicz & Taylor, 2000). A despeito disso, seu uso em fluidodinâmica computacional permanece praticamente inexplorado, contando com alguns poucos trabalhos (Buscaglia & Ruas, 2014; Ruas, 2013). Como proposta, os graus de liberdade desse elemento são as componentes da velocidade e suas derivadas nos vértices da triangulação, sendo a pressão interpolada utilizando o espaço conforme P_1 (uma interpolação de Hermite, em suma).

Este novo elemento, denotado por Z_2/P_1 (respectivamente, Z_3/P_2), comporta polinômios completos até grau dois (três) em velocidade e até grau um (dois) em pressão, estando assim bem balanceado para os problemas de Stokes e de Navier-Stokes com inércia moderada, com aproximação de segunda (terceira) ordem na norma natural. O interesse neles advém do fato de serem uma das poucas alternativas existentes para obter segunda (terceira) ordem em triângulos. Alternativamente ao Z_2/P_1 há o clássico elemento de Taylor-Hood (P_2/P_1), que tem a desvantagem de requerer distintas malhas para velocidade e pressão, e o elemento P_2^+/P_1^{disc} de Crouzeix-Raviart, cuja pressão é descontínua. Comparativamente, o Z_2/P_1 tem a vantagem de ter *todas* as incógnitas nos vértices e de ainda assim ser *div-estável*.

O elemento Z_2/P_1 é *div-estável* na formulação de Galerkin em malhas *criss-cross*⁴ (Buscaglia & Ruas, 2014). Em termos essenciais, porém, tal hipótese parece não ser necessária: pelo que aqui se evidencia nos experimentos numéricos, tal estabilidade também parece se fazer presente em malhas não-estruturadas arbitrárias. O Z_2/P_1 também é estável na formulação Galerkin-*Least-Squares* (Buscaglia & Ruas, 2014). Quanto à essa propriedade em sua versão de terceira ordem (Z_3/P_2), uma prova formal ainda não está disponível, mas novamente alguns resultados numéricos a suportam de modo experimental. Para o Z_3/P_2 são os resultados aqui presentes; para o Z_2/P_1 são os contidos em (Rodrigues *et al.*, 2013a,b).

No que se segue, reportamos resultados de convergência para o escoamento de Kovasznay na formulações de Galerkin. A despeito disso, e embora o novo elemento aqui apresentado não requeira estabilização, utilizamos uma implementação da formulação geral (NS-FVD), para inclusive permitir a possibilidade de comparações com elementos que requerem estabilizações (como o P_1/P_1 , por exemplo). Os resultados apresentados indicam a robustez dos elementos Z_2/P_1 e Z_3/P_2 , inclusive em escoamentos de inércia considerável.

⁴Malha de triângulos criada a partir de quadriláteros divididos por entre seus vértices opostos.

O elemento finito de Hermite é conhecido também como triângulo de Zienkiewicz (Zienkiewicz & Taylor, 2000). No nosso contexto ele se presta a aproximar o campo de velocidade localmente em cada triângulo K da malha. Seja G denotamos o baricentro de cada elemento K e por S_i seus vértices ($i = 1, \dots, d+1$, em que $d = 2, 3$ é a dimensão do espaço físico). Seja ainda λ_i a coordenada baricêntrica de K associada a S_i de modo que

$$h_{ij} \doteq d(S_i, S_j) \quad (\text{distância de } S_i \text{ a } S_j). \quad (2.30)$$

Denotamos por Z_2 o espaço de interpolação de velocidade constituído de polinômios cúbicos *incompletos* (e que contém o espaço P_2 de polinômios quadráticos). Nesse, os nove graus de liberdade estão postos nos vértices. São eles os valores nodais da função incógnita e suas primeiras derivadas direcionais ao longo das duas arestas adjacentes (por facilidade de *descrição* do elemento, assim são tomadas as derivadas direcionais). Para o espaço Z_3 há ainda uma incógnita adicional de valor em G , a “bolha”.

Localmente (*i.e.*, em cada triângulo K), o espaço Z_2 é gerado pelas nove funções linearmente independentes $[\{\zeta_i\}_{i=1}^3 \cup \{\zeta_{ij}\}_{i \neq j=1}^3]$, em que $\zeta_i = \lambda_i^3 - \varphi$ e $\zeta_{ij} = \lambda_i^2 \lambda_j - \varphi/2$. As nove funções de base canônica que correspondem aos graus de liberdade ora especificados são:

- Para o valor da função em S_i : $\varphi_i \doteq 3\lambda_i^2 - 2\zeta_i$, $i \in \{1, 2, 3\}$;
- Para as primeiras derivadas em S_i na direção $\overrightarrow{S_i S_j}/h_{ij}$: $\varphi_{ij} \doteq h_{ij} \zeta_{ij}$, $i, j \in \{1, 2, 3\}, i \neq j$.

Além disso, denotemos a função bolha de K por $\varphi = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3$ e por $P_m(K)$ o espaço de polinômios de grau igual ou menor do que m (em K) – no caso de cúbicas completas há ainda a função de valor em G . O conjunto das $(9+1)$ funções de base associadas a Z_3 são:

- Para a função de valor em S_i : $\varphi_i \doteq 3\lambda_i^2 - 2\zeta_i - 9\varphi$, $i \in \{1, 2, 3\}$;
- Para as primeiras derivadas em S_i na direção $\overrightarrow{S_i S_j}/h_{ij}$: $\varphi_{ij} \doteq h_{ij}(\zeta_{ij} - \varphi/2)$, $i, j \in \{1, 2, 3\}, i \neq j$.
- Para a função de valor em G : $\varphi_{123} \doteq 27\varphi$.

O subespaço de $P_3(K)$ para elementos Z_2 contém o espaço $P_2(K)$. Assim, se f é uma função em $H^{l+2}(K)$, sua Z_l -interpolada (denotada por $\Pi_K^l(f)$ e definida em K) satisfaz

$$\|f - \Pi_K^l(f)\|_{m,K} \leq C_m^l h^{l+2-m} \|f\|_{l+2,K}, \quad m \in \{0, 1, \dots, l+2\}, \quad (2.31)$$

em que C_m^l é uma constante independente de K e f . Para maiores detalhes, referimo-nos à Ciarlet (1978), Buscaglia & Ruas (2014) e Ruas (2013).

Os graus de liberdade de derivada anteriormente definidos não são convenientes do ponto de vista computacional, já que em um dado vértice as derivadas direcionais na direção dadas pelas arestas elementares não são coincidentes para todos os elementos. Todavia,

podemos tomar uma combinação linear de suas correspondentes funções de base com o intuito de expressá-las nas direções dos eixos cartesianos, isto é, em termos dos vetores unitários $\mathbf{e}^m$, $m = 1, \dots, d$ e então formar uma base ortonormal de $\mathbb{R}^d$ (assim a montagem das matrizes elementares leva a uma matriz global correta).

Para i, j distintos e $x_i^1, \dots, x_i^d$ sendo as coordenadas cartesianas de S_i

$$\varphi_i^m = \sum_{j=1, j \neq i}^{d+1} \varphi_{ij}(x_j^m - x_i^m). \quad (2.32)$$

Concretamente, a equação (2.32) se refere as funções de base φ_i^m pertencentes a Z_2 tais que $[\nabla \varphi_i^m \cdot \mathbf{e}^n](S_j) = \delta_{ij} \delta_{mn}$ e $\varphi_i^m(S_j) = 0$ para $i, j \in \{1, \dots, d+1\}$ e $m, n \in \{1, \dots, d\}$.

Naturalmente, as funções-base de valor φ_i não precisam de modificação, pois em todos os vértices seus gradientes se anulam por construção. Assim, a base $\{\Phi_1, \dots, \Phi_9\}$ do elemento Z_2 (ordenada de maneira a colocar juntos os graus de liberdade de um mesmo vértice) é dada por

$$\{\Phi_1, \dots, \Phi_9\} = \{\varphi_1, \varphi_1^1, \varphi_1^2, \varphi_2, \varphi_2^1, \varphi_2^2, \varphi_3, \varphi_3^1, \varphi_3^2\}. \quad (2.33)$$

Lembremos que Z_2 é o espaço definido pelo elemento de Zienkiewicz para cada componente da velocidade e P_1 é o espaço para a pressão. Essa escolha de V_h e Q_h caracteriza o elemento Z_2/P_1 . Seu número de incógnitas é de 18 para velocidade (valor e derivadas com relação a x e y , de cada componente da velocidade, em cada vértice do elemento) e 3 para pressão (valor nodal). Embora o Z_2/P_1 possua localmente maior número de graus de liberdade do que o elemento P_2/P_1 de Taylor-Hood (21 contra 15), do ponto de vista global ele apresenta menor número total de incógnitas (com valor assintótico de $7/9$)⁵. Isto se deve ao fato de que todos os seus graus de liberdade estão postos nos vértices do triângulo (o que não é o caso para o P_2/P_1 , que possui nós de velocidade nos pontos médios das arestas). Por esse mesmo motivo, o Z_2/P_1 permite a utilização de uma só malha para velocidade e pressão (embora não com a mesma interpolação para ambas). Para uso único, a variável c denota uma constante que independe de h em cada um das estimativas que se seguem.

Assim como o P_2/P_1 , o elemento Z_2/P_1 também é caracterizado como um elemento de segunda ordem na norma natural (*i.e.*, na norma $\|\mathbf{u}\|_{H^1(\Omega)} + \|p\|_{L^2(\Omega)}$). A esse respeito, recorremos as estimativas de interpolação para velocidade e pressão em problemas regulares

$$\min_{\mathbf{w}_h \in V_h} \left[\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \|\mathbf{u}(t) - \mathbf{w}_h\|_{H^p(K)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \leq c h^{3-p} \|\mathbf{u}(t)\|_{H^3(\Omega)} \quad p \in \{0, 1, 2\}, \quad (2.34)$$

$$\min_{q_h \in Q_h} \|p(t) - q_h\|_{H^q(\Omega)} \leq c h^{2-q} \|p(t)\|_{H^2(\Omega)} \quad q \in \{0, 1\}, \quad (2.35)$$

já que os espaços Z_2 e P_1 contêm os polinômios completos de grau menor do que ou igual a

⁵Comparando-se apenas os graus de liberdade de velocidade, o valor assintótico do número de incógnitas do Z_2 com relação ao P_2 é de $3/4$.

2 e 1, respectivamente.

Na norma natural de $V \times Q$, portanto, o elemento terá convergência ótima se

$$\|(\mathbf{u}(t_n), p(t_n)) - (\mathbf{u}_h^n, p_h^n)\|_{V \times Q} \leq c h^2. \quad (2.36)$$

Tal convergência pode ser provada rigorosamente para a formulação estabilizada ($c_\tau > 0$) para o problema linear de Stokes (Buscaglia & Ruas, 2014; Douglas & Wang, 1989; Hughes *et al.*, 1986) e por extensão para escoamentos nos quais o número de Reynolds é moderado (Franca & Hughes, 1993; Franca & Frey, 1992).

O elemento Z_2/P_1 é div-estável para malhas do tipo *criss-cross* (Buscaglia & Ruas, 2014). Para o Z_3/P_2 não há resultados teóricos, mas no que se segue mostramos fortes indícios de que a condição (2.12) parece estar sendo cumprida.

Além de permitir o uso de uma só malha para interpolar a velocidade e a pressão, uma outra vantagem adicional dos elementos Z_2/P_1 e Z_3/P_2 é a unicidade na definição de $\nabla \mathbf{u}_h$ nos vértices da triangulação, pois eles fornecem interpoladas de classe C^1 nos *nós* (mas não necessariamente ao longo das *arestas*). Isso possibilita que alternativamente a calcular a vorticidade $\omega_h \doteq \partial_x v_h - \partial_y u_h$ no decorrer da solução, que a computemos por meio de uma simples interpolação linear de seus valores nodais em cada triângulo (já que as *derivadas* da velocidade são graus de liberdade e portanto fornecidas na solução).

Denotando por $\mathcal{I}_1 \omega_h$ a interpolada P_1 de ω_h , resta mencionar qual é ordem de convergência de $\mathcal{I}_1 \omega_h$. Como de fato veremos nos experimentos numéricos, tanto para o Z_2/P_1 como para o Z_3/P_2 ,

$$\|\omega - \mathcal{I}_1 \omega_h\|_{0,2} \leq c h^2, \quad (2.37)$$

em que ω denota a vorticidade exata. Ademais,

$$\|\omega - \omega_h\|_{0,2} \leq c h^2, \quad \text{em } Z_2/P_1 \quad (2.38)$$

e

$$\|\omega - \omega_h\|_{0,2} \leq c h^3, \quad \text{em } Z_3/P_2. \quad (2.39)$$

Assim, para o elemento Z_2/P_1 a interpolada linear $\mathcal{I}_1 \omega_h$ resulta ter a mesma ordem de convergência $\mathcal{O}(h^2)$ da vorticidade ω_h (que é quadrática por partes). Embora assim não o seja para o Z_3/P_2 , evidentemente nesse caso $\mathcal{I}_1 \omega_h$ permanece com ordem de convergência $\mathcal{O}(h^2)$. Antes dos experimentos numéricos, vale ressaltar que os espaços de aproximação descritos necessitam de apenas *uma* malha de triângulos lineares, permitindo uma representação direta da vorticidade.

2.2.1. Resultados numéricos

Consideraremos como problema-teste o escoamento de Kovasznay (Kovasznay, 1948), que possui a seguinte solução analítica bidimensional (estacionária) para as equações de Navier-Stokes incompressíveis

$$u(x, y) = 1 - e^{\lambda x} \cos(2\pi y), \quad (2.40)$$

$$v(x, y) = \frac{\lambda}{2\pi} e^{\lambda x} \sin(2\pi y), \quad (2.41)$$

$$p(x, y) = p_0 - \frac{\rho}{2} e^{2\lambda x}, \quad (2.42)$$

em que p_0 é uma constante arbitrária (a qual escolhemos ser nula) e

$$\lambda = \frac{\rho}{2\mu} - \left[\left(\frac{\rho}{2\mu} \right)^2 + 4\pi^2 \right]^{\frac{1}{2}} < 0. \quad (2.43)$$

2.2.2. Condições de contorno, domínio computacional e malhas

Resolvemos numericamente o escoamento de Kovasznay no domínio computacional $\Omega = [0, 30] \times [0, 1/2]$, impondo, na borda esquerda $u(x, y)$ e $v(x, y)$ dados por (2.40) e (2.41). Nas bordas superior e inferior, $v(x, y)$ dado por (2.41) (*i.e.*, zero) e $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\tilde{n}})_y = 0$. Na borda direita há a condição de contorno natural $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\tilde{n}})_x = 0$. Os sub-índices x e y denotam a primeira e segunda componentes do vetor $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\tilde{n}}$.

Para análise de convergência dos espaços de aproximação Z_2/P_1 e Z_3/P_2 utilizamos quatro malhas não-estruturadas (incluímos também o P_2/P_1 para comparação). Na Tabela 2.1 as descrevemos, inclusive especificando o número total de incógnitas para cada espaço. O Z_2/P_1 apresenta menor número de incógnitas do que o P_2/P_1 (de fato, com valor assintótico de 7 para 9). Para a mesma triangulação, embora o Z_3/P_2 resulte em um número de incógnitas ligeiramente maior do que o P_2/P_1 , ele possui a vantagem de alcançar não segunda, senão que terceira ordem de aproximação (de acordo com os resultados reportados a seguir).

Tabela 2.1: Número total de incógnitas em cada espaço de aproximação; malhas de elementos triangulares construídas no *software* livre *Gmsh* (Geuzaine & Remacle, 2009).

Malha	# Elem.	# Vértices	$\bar{h}^\ddagger$	# Incóg. Z_2/P_1	# Incóg. P_2/P_1	# Incóg. Z_3/P_2
K ₁	1010	612	0.2033	4284	5078	5905
K ₂	4040	2233	0.1016	15631	19243	21903
K ₃	16160	8505	0.0508	59535	74843	84199
K ₄	64640	33169	0.0254	232183	295123	329991

[‡]Comprimento médio das arestas.

2.2.3. Estudos de convergência

Em posse da solução analítica do escoamento de Kovasznay, verificamos a ordem de convergência da solução numérica fornecida pelos elementos finitos Z_2/P_1 e Z_3/P_2 . Os resultados para o espaço de aproximação velocidade-pressão Z_2/P_1 serão omitidos pois foram reportados em artigos de congresso (Rodrigues *et al.*, 2013a,b). Para verificar a implementação do elemento Z_3/P_2 estabelecemos um teste com uma solução manufaturada como se segue.

Para obter como solução um polinômio cúbico (em duas dimensões, x e y) para as velocidades u e v escolhemos uma função corrente de grau 4 e impomos a pressão p como sendo um polinômio de grau dois nas variáveis x e y . De modo a fazer com que o escolhido par velocidade-pressão se torne uma solução das equações de Navier-Stokes, escolhemos adequadamente uma força $\rho \mathbf{b}$ para que assim o seja. Quanto às condições de contorno, na fronteira do domínio quadrado $[0, 1] \times [0, 1]$ impusemos os valores analíticos de $u(x, y)$ e $v(x, y)$. Nesse caso, como a pressão fica indeterminada a menos de uma constante impusemos também um valor de pressão em um nó da malha (consistente com a pressão polinomial imposta como solução). Utilizando uma malha regular formada por 8 triângulos adjacentes, obtivemos erro zero para solução numérica (já que a solução cúbica é uma função que pertence ao espaço de aproximação Z_3/P_2), atestando o êxito da implementação.

Quanto à convergência, na Figura 2.1 observamos que a ordem ótima para a velocidade-pressão é atingida ao se utilizar o Z_3/P_2 (ordem $\mathcal{O}(h^3)$ na norma natural). Vale mencionar que assim o obtivemos para a formulação de Galerkin, ou seja, sem o uso de qualquer estabilização. Introduz-se assim a possibilidade de se obter ordem cúbica (na norma natural) utilizando um elemento finito que possui graus de liberdade postos apenas nos vértices da triangulação.

Na Figura 2.2 apresentamos um resultado numérico que atesta as desigualdades (2.37) e (2.39) referentes à vorticidade numérica ω_h e à vorticidade interpolada $\mathcal{I}_1 \omega_h$. Há ordem de convergência $\mathcal{O}(h^3)$ para ω_h no espaço de aproximação Z_3/P_2 . Isso já era de se esperar, pois na Figura 2.1 tem-se que a norma L^2 do erro de velocidade converge cubicamente. A interpolada linear $\mathcal{I}_1 \omega_h$ possui convergência quadrática, o que justifica uma simples interpolação linear da vorticidade a partir dos valores nodais de $\nabla \mathbf{u}_h$. À isso soma-se ainda a facilidade de obtenção de outras quantidades de interesse físico que também dependem das derivadas das componentes de velocidade (como a tensão de cisalhamento, por exemplo).

Figura 2.1: Ordens de convergência da velocidade e pressão para o elemento Z_3/P_2 na formulação de Galerkin (norma L^2 do erro em função de h). Resultados obtidos para o escoamento de Kovasznay a $\rho = 40$ e $\mu = 1$.

Figura 2.2: Ordens de convergência das vorticidades ω_h e $\mathcal{J}_1 \omega_h$ (e ainda da diferença $\mathcal{J}_1 \omega_h - \omega_h$) para o elemento Z_3/P_2 na formulação de Galerkin. Resultados obtidos para o escoamento de Kovasznay a $\rho = 40$ e $\mu = 1$.

A seguir, resumizamos os resultados obtidos dos novos espaços de aproximação.

Apresentamos os novos espaços de aproximação Z_2/P_1 e Z_3/P_2 para escoamentos incompressíveis na formulação velocidade-pressão para as equações de Navier-Stokes dependentes do tempo. Considerando testes numéricos para escoamentos com inércia, verifica-

mos que tais elementos se comportam de maneira estável e robusta, sem modos espúrios de pressão ou dificuldades de convergência do sistema não-linear. Sem estabilização, e com menor número de incógnitas do que o elemento simplicial de mesma ordem (assintoticamente $7/9$ do número de incógnitas do P_2/P_1 para a *mesma triangulação*), o elemento Z_2/P_1 resultou ter ordem de convergência ótima na norma natural (e o Z_3/P_2 também).

Com vistas às membranas lipídicas, o elemento Z_2/P_1 poderia ser implementado considerando-se em domínios não-planos como um bom candidato à aproximação do operador de Boussinesq-Scriven (Gross & Reusken, 2011; Tasso & Buscaglia, 2013). De fato, essa era nossa intenção inicial, mas outras investigações mais promissoras foram priorizadas (simulações numéricas de membranas viscosas *abertas*, pinçamento membranal, entre outras).

Com relação ao escoamento de *fluidos superficiais*, o domínio de solução é curvo e também evolui com a própria solução. Qual é a equação de movimento para o escoamento de *superfícies* viscosas em $\mathbb{R}^3$?

2.3. Operador de Boussinesq-Scriven

Um lipossoma pode alcançar diâmetros de até 100 μm , porém a espessura de sua bicamada lipídica é sempre de tamanho nanométrico (Vriezema *et al.*, 2004). Isso permite representá-lo idealmente como uma superfície $\Gamma \subset \mathbb{R}^3$, fechada, orientável e de classe C^2 . Na matemática do seu escoar surgem naturalmente operadores diferenciais superficiais. A esse respeito, fazemos um breve recorte da geometria diferencial de superfícies no Apêndice A. Para tanto, os operadores tangenciais de interesse (∇_Γ , $\nabla_\Gamma \cdot$, Δ_Γ , D_Γ) são expressos em termos do tensor projetor e de derivadas parciais. Em termos simples, o operador ∇_Γ é o mesmo que operador “nabla”, ∇ , mas no espaço definido pela superfície Γ . Ademais, no que se segue, κ e K denotam respectivamente as curvaturas média escalar e gaussiana de Γ , cujas respectivas definições estão em (23) e (24) no Apêndice A.

De início, vejamos um paralelo entre a forma clássica das equações de Navier-Stokes em domínios euclidianos e sua análoga para domínios *curvos*. Daqui por diante, para evitarmos confusões, associaremos o rótulo “B” (de *bulk*), em subscrito, àquelas quantidades associadas ao fluido em volume (fluido circundante).

As equações para o escoamento de fluidos superficiais remontam principalmente à J. V. Boussinesq e à L. E. Scriven e, de modo secundário, à Oldroyd (1955) e à Ericksen (1952). O pioneirismo é de Boussinesq (1913), porém suas equações foram deduzidas em um sistema de coordenadas formado pelos eixos principais da taxa de deformação^{6,7}. Para uma superfície *viscosa*, com *rigidez de curvatura* e *inextensível*, as equações governantes são (Scriven,

⁶Infelizmente, não tivemos acesso ao trabalho de Boussinesq (1913); nosso comentário é atribuído à Scriven (1960).

⁷Os eixos principais do tensor taxa de deformação são os autovetores desse tensor.

1960; Gross & Reusken, 2011)

$$(BS-EDP) \left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \mu \left[K \mathbb{P} \mathbf{u} + \check{\mathbf{n}} \times \nabla_{\Gamma} (\check{\mathbf{n}} \cdot \nabla_{\Gamma} \times \mathbf{u}) + 2 (\check{\mathbf{n}} \times \nabla_{\Gamma} \check{\mathbf{n}} \times \check{\mathbf{n}}) \cdot \nabla_{\Gamma} (\check{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{u}) \right] + \\ + 2 \mu (\check{\mathbf{n}} \times \nabla_{\Gamma} \check{\mathbf{n}} \times \check{\mathbf{n}} : \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}) \check{\mathbf{n}} + \nabla_{\Gamma} \pi_s - \kappa \pi_s \check{\mathbf{n}} = \mathbf{F}, \end{array} \right. \quad (2.44)$$

$$\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.45)$$

em que π_s é a pressão *superficial* e $\check{\mathbf{n}}$ é o versor normal exterior à superfície Γ . Além disso, $\mathbb{P}$ é o chamado projetor tangencial, cuja definição ($\mathbb{P} \doteq \mathbb{I} - \check{\mathbf{n}} \otimes \check{\mathbf{n}}$) é apresentada em (A.7) no Apêndice A. Os parâmetros materiais μ e ρ são a viscosidade e massa específica *superficiais* de Γ . Suas unidades de medida são, respectivamente, Pa·s·m e kg/m² (e não em Pa·s e kg/m³). Apesar de não termos especificado nenhuma condição de contorno em (BS-EDP) (de fato não há condições de contorno se Γ é uma superfície fechada), notar a semelhança de (2.44) e (2.45) com as equações de Navier-Stokes incompressíveis – (2.1) e (2.2) em (NS-EDP).

A notação $D(\cdot)/Dt$ em (2.44) não representa uma derivada material no sentido clássico tal como em (2.1). Se assim o fosse, as coordenadas espaciais teriam que estar fixas para que $\partial(\cdot)/\partial t$ fizesse sentido, o que em geral não ocorre em se tratando do escoar de superfícies⁸. Scriven atenta para esse fato dizendo que sua formulação *não* diz respeito à componentes normais da aceleração, da força, e da velocidade (Scriven, 1960) e então ela é válida à geometria fixa. A *derivada material para superfícies móveis*⁹ bem como outras relações de transporte foram estabelecidas por Cermelli *et al.* (2005); ver também Dziuk & Elliott (2013).

Analogamente ao operador de Stokes, dado por

$$-\mu_B \nabla^2 \mathbf{u}_B + \nabla p_B, \quad (2.46)$$

o operador diferencial para fluidos superficiais é

$$-\mathcal{S}_{\Gamma} \mathbf{u} + \nabla_{\Gamma} \pi_s - \kappa \pi_s \check{\mathbf{n}}, \quad (2.47)$$

o qual, por ocasião de (2.44), é então denominado *operador de Boussinesq-Scriven*. Como vemos em (2.44), uma expressão explícita $\mathcal{S}_{\Gamma}$ não é algo simples. De fato, $\mathcal{S}_{\Gamma} \mathbf{u}$ é dado pela soma dos dois termos que envolvem μ em (2.44). Em linguagem de formas diferenciais ele é encontrado no valioso artigo de Arroyo & DeSimone (2009).

A complicação de (2.44) reside no fato de que as curvaturas também são incógnitas, e então o domínio de solução dela mesmo depende. E não só que a curvatura não é conhecida *a priori*, senão que a *superfície* (móvel) também é desconhecida, dado que ela mesma *escoa*. Assim, Γ tem que ser representada adequadamente como um domínio móvel definido em um espaço não-euclidiano.

⁸A menos de um escoamento superficial exclusivamente tangencial, uma situação especial na qual a forma da superfície não se altera.

⁹Por vezes chamada de derivada material *normal*.

Além da viscosidade, as superfícies de nosso interesse possuem ainda rigidez de curvatura. À considerar, portanto, há a dissipação viscosa e as forças elásticas (ambas intrínsecas à Γ) e também possíveis forças externas (do fluido em volume e eventualmente outras). Ao dar demasiada atenção ao fluido em volume (inclusive preocupando-nos também com sua solução numérica), porém, pouco estaríamos contribuindo à mecânica de bicamadas lipídicas em si, este sim um tema muito mais “urgente” e no qual ainda há muito a ser feito. Justificadamente, portanto, e em primeira instância, consideraremos o fluido ambiente apenas como exercendo uma força de pressão sobre a bicamada lipídica. Assim sendo, os esforços computacionais podem ser exclusivamente dedicados ao escoar das membranas.

É importante ressaltar quando a dissipação viscosa da membrana predomina sobre a dissipação viscosa do fluido de imersão. Este é o caso para membranas cujo tamanho característico ℓ_0 seja menor do que o comprimento de Saffman-Delbrück, dado por (Saffman & Delbrück, 1975)

$$\ell_{sd} = \frac{\mu}{\mu_b}, \quad (2.48)$$

que é uma escala natural de comprimento, já que μ é a viscosidade *superficial* da membrana e μ_b é a viscosidade dinâmica do fluido circundante. Para uma hemácia ($\ell_0 = 8 \mu\text{m}$, Lim *et al.* (2002) e $\mu \approx 10^{-8} \text{ Pa}\cdot\text{s}\cdot\text{m}$, Waugh (1982b)) em ambiente aquoso ($\mu_{\text{bH}_2\text{O}@20^\circ\text{C}} = 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$), ℓ_{sd} é igual a $10 \mu\text{m}$ e então os efeitos viscosos superficiais predominam. Não se trata aqui de um exemplo insólito: a dissipação viscosa de membranas lipídicas de fato predomina em sistemas biológicos típicos (Dimova *et al.*, 2006).

Por fim, a inércia da membrana ou do fluido ambiente não é relevante na escala de interesse e assim a equação (1.1), a saber

$$\mathfrak{D}_\Gamma(\mathbf{v}) + \int_{\Omega} \rho_b \mathbf{a} \cdot \mathbf{v} = -d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) + \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} + \int_{\Omega} \rho_b \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \quad \forall \mathbf{v} \in V(\Gamma),$$

é simplificada de modo que

$$\mathfrak{D}_\Gamma(\mathbf{v}) = -d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) + \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Gamma \quad \forall \mathbf{v} \in V(\Gamma), \quad (2.49)$$

em que $\mathfrak{D}_\Gamma(\mathbf{v})$ passa a ter apenas a contribuição da dissipação viscosa membranal (já que $\ell_0 < \ell_{sd}$) e em fenômenos nos quais a inércia do fluido circundante também é irrelevante. Notar que o termo da força $\mathbf{f}$ implicitamente inclui a força que o fluido exerce sobre a membrana. Ademais, caso desejássemos considerar a dissipação viscosa do fluido em volume, poderíamos adicioná-la diretamente em (2.49).

Para superfícies, a dissipação viscosa é definida exatamente como para fluidos em volume, isto é,

$$\mathfrak{D}_\Gamma(\mathbf{v}) \doteq \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} : D_\Gamma \mathbf{v} d\Gamma, \quad (2.50)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}$ é a versão tangencial do tensor de tensões clássico, $\mathbf{v}$ é uma velocidade virtual e $D_\Gamma \mathbf{v}$ é a taxa de deformação virtual superficial definida como

$$D_\Gamma \mathbf{v} \doteq \frac{1}{2} \mathbb{P} (\nabla_\Gamma \mathbf{v} + \nabla_\Gamma \mathbf{v}^T) \mathbb{P}, \quad (2.51)$$

o análogo superficial do gradiente simétrico usual $D\mathbf{v} = (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)/2$. Formas alternativas de se calcular D_Γ são discutidas na Observação B.1 do Apêndice B.

A reologia de interfaces viscosas é governada pela lei de Boussinesq-Scriven (Scriven, 1960; Gross & Reusken, 2011). Trata-se de uma análoga tangencial da lei constitutiva newtoniana, a saber

$$\boldsymbol{\sigma} = (-p_s + \lambda \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u}) \mathbb{P} + 2\mu D_\Gamma \mathbf{u}, \quad (2.52)$$

em que λ e μ são coeficientes de viscosidade superficial, $\mathbf{u}$ é a velocidade material das partículas membranais e p_s é uma pressão termodinâmica superficial, a qual requer uma lei de fechamento.

Não obstante, uma membrana é dita *inextensível* quando a seguinte restrição é cumprida

$$\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.53)$$

matematicamente obtida quando $\lambda \rightarrow \infty$. Nesse caso, existe uma *pressão superficial* π_s que cumpre (independentemente de uma lei de fechamento para p_s)

$$\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} (-p_s + \lambda \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u}) = -\pi_s, \quad (2.54)$$

em que π_s não é algo senão o multiplicador de Lagrange associado a divergência superficial nula dada por (2.53). Observamos que a pressão superficial π_s também pode ser fisicamente interpretada como o negativo de uma tensão superficial. Assim, para membranas de área constante

$$\boldsymbol{\sigma} = -\pi_s \mathbb{P} + 2\mu D_\Gamma \mathbf{u}. \quad (2.55)$$

A forma bilinear que expressa a potência virtual gerada pela tensão $\boldsymbol{\sigma}$, ao longo de um campo de velocidade virtual $\mathbf{v}$, e que corresponde à velocidade $\mathbf{u}$ e à pressão superficial π_s é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{B}((\mathbf{u}, \pi_s), \mathbf{v}) &= \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma} : D_\Gamma \mathbf{v} d\Gamma = \\ &= \int_\Gamma 2\mu D_\Gamma \mathbf{u} : D_\Gamma \mathbf{v} d\Gamma - \int_\Gamma \pi_s \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{v} d\Gamma, \end{aligned} \quad (2.56)$$

a qual possui a mesma estrutura da forma bilinear de Stokes

$$\mathcal{S}((\mathbf{u}_B, p_B), \mathbf{v}) = \int_{\Omega} 2\mu_B D\mathbf{u}_B : D\mathbf{v} d\Omega - \int_{\Omega} p_B \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega, \quad (2.57)$$

notar que as integrais são avaliadas sobre Ω .

Para adiantar uma primeira discussão da solução numérica do operador de Boussinesq-Scriven já no presente capítulo, vamos agrupar a força elástica ($-d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v})$) e demais forças aplicadas em uma única força vetorial *total* (na qual também se incluem possíveis forças advindas do fluido em volume). Associando à ela o funcional linear $\mathfrak{F}(\mathbf{v})$ resulta o seguinte “problema de Stokes em superfície”

$$(BS-FV) \begin{cases} \mathcal{B}((\mathbf{u}, \pi_s), \mathbf{v}) = \mathfrak{F}_T(\mathbf{v}) & \forall \mathbf{v} \in V(\Gamma), \\ \int_{\Gamma} \xi \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} d\Gamma = 0 & \forall \xi \in Q(\Gamma). \end{cases} \quad (2.58)$$

$$(2.59)$$

(BS-FV) é a versão variacional de (BS-EDP).

Sua analogia com o problema de Stokes clássico é direta

$$(Stokes-FV) \begin{cases} \mathcal{S}((\mathbf{u}_B, p_B), \mathbf{v}) = \mathfrak{f}(\mathbf{v}) & \forall \mathbf{v} \in V(\Omega), \\ \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u}_B d\Omega = 0 & \forall q \in Q(\Omega), \end{cases} \quad (2.60)$$

$$(2.61)$$

em que agora o funcional linear $\mathfrak{f}(\mathbf{v})$ está associado à força aplicada sobre um dado fluido em volume, apenas. O passo seguinte é discutir a discretização *espacial* de (BS-FV), que aliás se dá em um espaço não-euclidiano.

Embora não tenhamos dito explicitamente, (BS-EDP) é um sistema de equações diferenciais parciais em uma *superfície*. Evidentemente, o domínio de solução em (BS-FV) é um espaço curvo de forte natureza geométrica. À discretização, nesse cenário, são necessários elementos finitos *superficiais*.

2.4. Elementos finitos superficiais

Os elementos finitos superficiais foram estabelecidos formalmente por G. Dziuk, sendo sua apresentação mais completa encontrada em (Dziuk & Elliott, 2013) e (Deckelnick *et al.*, 2005). Consistem de uma triangulação linear $\mathcal{T}_h$ cujos vértices jazem exatamente sobre Γ , superfície exata esta suposta de classe C^2 de modo a permitir uma correspondência biunívoca entre os pontos de Γ_h e de Γ . As funções-base definidas no espaço discreto Γ_h são

então estendidas à Γ , definindo sobre ela um espaço *curvo* de elementos finitos. Esse espaço é então denominado *espaço estendido*, cuja construção é ilustrada na Figura 2.3 (apenas *um* elemento é exibido).

Ainda que possa parecer exagerado “apoiar-se” na superfície exata, os espaços estendidos são fundamentais do ponto de vista teórico para poder formalizar resultados. Na análise numérica em elementos finitos superficiais, sua importância real ficará clara em nosso contexto na discretização espacial do operador de Boussinesq-Scriven.

Figura 2.3: Extensão do espaço de elementos finitos da superfície triangulada Γ_h à superfície exata Γ , exemplificada para um único elemento. As duas superfícies são coincidentes nos vértices de Γ_h , de modo que Γ está deslocada apenas para melhor visualização. Assim, Γ_h define sobre Γ uma triangulação *curva*.

2.4.1. Superfícies trianguladas

Sobre a discretização do espaço de solução – *i.e.*, da superfície contínua Γ – está a discretização da equação a ser resolvida. Em geral, Γ é discretizada em uma superfície polinomial por partes, Γ_h . Isso acarreta um erro geométrico de representação, cuidadosamente discutido e analisado por Dziuk & Elliott (2013).

Os espaços de elementos finitos superficiais são construídos sobre Γ_h , mas sua análise numérica se dá sobre Γ (ou, mais precisamente, sobre a triangulação que Γ_h induz em Γ via espaços estendidos). Formalmente, Γ_h é a reunião de um número finito de simpliciais d -dimensionais não-degenerados (fechados) em $\mathbb{R}^{d+1}$. Se $\mathcal{T}_h$ é o conjunto desses simpliciais, Γ_h é definido como

$$\Gamma_h \doteq \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T. \quad (2.62)$$

Ademais, os vértices $X_j (j = 1, 2, J)$ da triangulação $\mathcal{T}_h$ são escolhidos pertencentes à Γ , sendo que para $T, \tilde{T} \in \mathcal{T}_h$, ou $T \cap \tilde{T} = \emptyset$ ou $T \cap \tilde{T}$ é um simplicial $(n - k)$ -dimensional comum a T e $\tilde{T}$. A fim de evitar que Γ seja coberta com sobreposições, é suposto que para cada ponto $\mathbf{a} \in \Gamma$ haja no máximo um ponto $\mathbf{x} \in \Gamma_h$ tal que $\mathbf{a} = \mathbf{a}(\mathbf{x})$. Isso implica a existência de uma correspondência biunívoca entre os triângulos de Γ_h e os triângulos curvilineares em Γ induzidos pela extensão. Para tanto, é suficiente que Γ seja de classe C^2 (a condição necessária e suficiente é que a superfície seja Lipschitz).

Seja $\mathcal{D}_\delta(\Gamma)$ uma vizinhança da superfície Γ . A *extensão normal* ou simplesmente *extensão* de uma função f definida em Γ a um ponto $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta(\Gamma)$ é construída pondo como imagem da função estendida $\hat{f}$ a imagem de f definida em Γ . A apresentação formal dessa ideia é dada no Apêndice A, onde apresentamos algumas notas sobre o *Cálculo em superfícies*. Nele, a razão da introdução do conceito é a formalização de operadores diferenciais em superfícies. Aqui, entretanto, a extensão normal se presta à construção de um espaço auxiliar para Γ_h (o espaço estendido).

Quanto ao espaço de elementos finitos propriamente dito, em Γ_h ,

$$S_h = \{\phi_h \in C^0(\Gamma_h); \phi_h|_T \text{ é afim em cada } T \in \mathcal{T}_h\}. \quad (2.63)$$

Seu espaço estendido de elementos finitos é

$$\hat{S}_h = \{\varphi_h = \hat{\phi}_h; \phi_h \in S_h\}. \quad (2.64)$$

Como na teoria de elementos finitos clássica, é importante estabelecer algumas desigualdades em norma para espaços definidos em superfícies. Em nosso contexto, as principais são as desigualdades de Poincaré, Korn, inversa e alguns resultados de interpolação.

Teorema 2.4.1. (*Desigualdade de Poincaré*) Seja $\Gamma \in C^3$ e $1 \leq p < \infty$. Assim sendo, existe uma constante C_P tal que para toda função $f \in H^{1,p}(\Gamma)$ de média zero¹⁰ (i.e., que cumpre que $\int_\Gamma f d\Gamma = 0$) vale a desigualdade

$$\|f\|_{L^p(\Gamma)} \leq C_P \|\nabla_\Gamma f\|_{L^p(\Gamma)}. \quad (2.65)$$

Demonstração. Ver Dziuk & Elliott (2013). ■

A média zero da hipótese no Teorema 2.4.1 é equivalente a dizer que a superfície Γ está sob restrição de translação rígida.

Hipótese 2.4.2. (*Uma desigualdade do tipo Korn*) Sendo Γ uma superfície fechada simplesmente conexa, existe uma constante C_K tal que

$$\|\nabla_\Gamma \mathbf{v}\|_0 \leq C_K \|D_\Gamma \mathbf{v}\|_0 \quad \forall \mathbf{v} \in H^1(\Gamma)^d. \quad (2.66)$$

A desigualdade acima indica que as rotações rígidas estão restritas. Em nosso contexto de superfícies, a validade de (2.66) é um assunto delicado. Como discutido em profundidade por Gluck (2006), “quase todas” as superfícies simplesmente conexas fechadas são

¹⁰A hipótese de média nula é necessária para atrelar a imagem de f ao valor zero. Caso contrário, a desigualdade não é sequer satisfeita trivialmente: se f é uma função cuja imagem é uma constante estritamente positiva para todos os valores de seu domínio, então a desigualdade de Poincaré nunca é satisfeita.

rígidas, de modo que a desigualdade (2.66) é “estatisticamente” verdade¹¹. Contra-exemplos são casos extremos e raros (Connelly, 1979).

A hipótese a seguir leva em conta o fato de que S_h é um espaço de dimensão finita.

Hipótese 2.4.3. (*Desigualdade Inversa*) Existe uma constante C_I tal que

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left(h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C_I \|\pi_h\|_0 \quad \forall \pi_h \in S_h. \quad (2.67)$$

Hipótese 2.4.4. (*Interpolada de Clément*) Existe um operador $\mathcal{C}_h : V \rightarrow V_h$ tal que

$$\|\mathcal{C}_h \mathbf{v}\|_{H^1(\Gamma)} \leq C_{C_1} \|\mathbf{v}\|_{H^1(\Gamma)} \quad \forall \mathbf{v} \in V \subset H^1(\Gamma)^d. \quad (2.68)$$

$$\|\mathbf{v} - \mathcal{C}_h \mathbf{v}\|_{L^2(\Gamma)} \leq C_{C_2} h_K \|\nabla_\Gamma \mathbf{v}\|_{L^2(\omega_K)} \quad \forall \mathbf{v} \in V \subset H^1(\Gamma)^d. \quad (2.69)$$

em que ω_K é a união de todos os elementos que compartilham ao menos um nó com o elemento K (Clément, 1975; Ern & Guermond, 2004).

2.4.2. Discretização espacial do problema de Boussinesq-Scriven

A formulação variacional discreta no espaço associada à (BS-FV) é

$$(BS-FVDE) \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Gamma_h} 2\mu D_\Gamma \mathbf{u}_h : D_\Gamma \mathbf{v} - \int_{\Gamma_h} \pi_h \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{v} = \int_{\Gamma_h} \mathbf{f}_T \cdot \mathbf{v} \quad \forall \mathbf{v} \in V_h, \quad (2.70) \\ \int_{\Gamma_h} \xi \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u}_h + \alpha \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K h_K^2 \nabla_\Gamma \pi_h \cdot \nabla_\Gamma \xi = 0 \quad \forall \xi \in Q_h. \quad (2.71) \end{array} \right.$$

Em (2.71) há um termo estabilizador do tipo SPGP, mas sem a projeção do gradiente de pressão, *i.e.*, com $\mathbf{g}_h \equiv 0$ em (2.26). Em domínios euclidianos, esse método foi introduzido por Brezzi & Pitkäranta (1984).

Em notação compacta, (BS-FVDE) é escrito como

$$(BS-FVDE) \left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{v}, \xi) = \mathfrak{F}_T(\mathbf{v}) \quad \forall (\mathbf{v}, \xi) \in V_h \times Q_h, \end{array} \right. \quad (2.72)$$

em que

$$\mathfrak{B}_h(\mathbf{w}, r; \mathbf{v}, \xi) = a(\mathbf{w}, \mathbf{v}) - b(\mathbf{v}, r) - b(\mathbf{w}, \xi) - c_h(r, \xi), \quad (2.73)$$

¹¹A história desse problema remonta à Euler, que em 1799 em uma carta à Lagrange conjecturou que superfícies fechadas são rígidas (Euler, 1862).

com as formas bilineares simétricas $a(\cdot, \cdot)$ e $c_h(\cdot, \cdot)$ e a forma bilinear $b(\cdot, \cdot)$ dadas por

$$a(\mathbf{w}, \mathbf{v}) \doteq \int_{\Gamma_h} 2\mu D_\Gamma \mathbf{w} : D_\Gamma \mathbf{v}, \quad (2.74)$$

$$b(\mathbf{v}, \xi) \doteq \int_{\Gamma_h} \xi \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{v}, \quad (2.75)$$

$$c_h(r, \xi) \doteq \alpha \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K h_K^2 \nabla_\Gamma r \cdot \nabla_\Gamma \xi. \quad (2.76)$$

A primeira questão a ser respondida seria sobre a convergência de (BS-FVED), mas como vamos utilizar um resultado de estabilidade para prová-la, por ele iniciaremos.

Utilizando-nos do lema a seguir, inspirado no chamado Lema de Verfürth (Verfürth, 1984), vamos mostrar que $\mathfrak{B}_h(\cdot, \cdot; \cdot, \cdot)$ satisfaz uma condição inf-sup discreta e que ela define um método div-estável. Salvo quando denotado explicitamente, as normas a seguir são tomadas no espaço Γ (e não em Γ_h) utilizando-se do conceito de espaço estendido.

Lema 2.4.5. *Se Q_h é um espaço de funções contínuas, então existem constantes positivas C_1 e C_2 tais que*

$$\sup_{V_h \ni \mathbf{v} \neq 0} \frac{b(\mathbf{v}, \pi_h)}{\|\mathbf{v}\|_1} \geq C_1 \|\pi_h\|_0 - C_2 \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \forall \pi_h \in Q_h. \quad (2.77)$$

Demonstração. É um caso particular da Proposição 7 estabelecida por Buscaglia (2015), que por sua vez utiliza a Hipótese 2.4.4. ■

Vejamos que a forma bilinear $\mathfrak{B}_h(\cdot, \cdot; \cdot, \cdot)$ em (BS-FVDE) define um método div-estável.

Teorema 2.4.6. *(Estabilidade) Se $a(\cdot, \cdot)$ é fortemente coerciva, então*

$$\sup_{V_h \times Q_h \ni (\mathbf{v}, \xi) \neq (0,0)} \frac{\mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{v}, \xi)}{\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0} \geq \beta (\|\mathbf{u}_h\|_1 + \|\pi_h\|_0) \quad \forall (\mathbf{u}_h, \pi_h) \in V_h \times Q_h, \quad (2.78)$$

em que $\beta > 0$ é uma constante independente de h .

Demonstração. Primeiramente, pelas desigualdades triangular e de Poincaré (Teorema 2.4.1),

$$\|\nabla_\Gamma \mathbf{v}\|_0 + \|\xi\|_0 \leq \|\nabla_\Gamma \mathbf{u}_h\|_0 + \delta \|\nabla_\Gamma \mathbf{w}\|_0 + \|\pi_h\|_0$$

$$C_P \|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0 \leq \|\mathbf{u}_h\|_1 + \delta \|\mathbf{w}\|_1 + \|\pi_h\|_0$$

$$\min\{1, C_P\} (\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0) \leq \|\mathbf{u}_h\|_1 + \delta C_s \|\pi_h\|_0 + \|\pi_h\|_0$$

$$\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0 \leq C_0 (\|\mathbf{u}_h\|_1 + \|\pi_h\|_0). \quad (2.79)$$

Sob a hipótese de $a(\cdot, \cdot)$ ser fortemente coerciva e novamente pela desigualdade de Poincaré (Teorema 2.4.1),

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{u}_h, -\pi_h) &= 2 \|\mu D_\Gamma \mathbf{u}_h : D_\Gamma \mathbf{u}_h\|_0^2 + \alpha \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \\ &\geq C_\mu C_P^2 \|\mathbf{u}_h\|_1^2 + \alpha \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \\ &\geq C_\alpha \left(\|\mathbf{u}_h\|_1^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right) \end{aligned} \quad (2.80)$$

$$\begin{aligned} &\geq C_\alpha \left(\|\mathbf{u}_h\|_1^2 + \min_K \{h_K^2\} \widetilde{C}_P^2 \|\pi_h\|_0^2 \right) \\ &\geq C_{\alpha,h} \left(\|\mathbf{u}_h\|_1^2 + \|\pi_h\|_0^2 \right). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Tomando o supremo em (2.81), de (2.79) e da desigualdade entre médias quadráticas e aritmética, a saber,

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{x^2 + y^2}{2}} &\geq \frac{x + y}{2} \quad (\forall x, y \in \mathbb{R}, x, y > 0) \\ x^2 + y^2 &\geq \frac{(x + y)^2}{2} \quad (\forall x, y \in \mathbb{R}, x, y > 0) \end{aligned} \quad (2.82)$$

segue que a desigualdade (2.78) é satisfeita para uma constante dependente de h . Esse é um resultado intermediário que por ora já estabelece que o problema discreto tem solução única.

Prosseguindo, sejam $(\mathbf{u}_h, \pi_h) \in V_h \times Q_h$ e $\mathbf{w}$ a função para a qual o supremo do Lema 2.4.5 é atingido e re-escalada de modo que $(\|\mathbf{w}\|_1 / C_s) = \|\pi\|_0$, com C_s uma constante real positiva. Do Lema 2.4.5 e da clássica Desigualdade de Cauchy-Schwarz,

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; -\mathbf{w}, 0) &= -a(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}) + b(\mathbf{w}, \pi_h) \\ &\geq -2 \left(\|\mu D_\Gamma \mathbf{u}_h : D_\Gamma \mathbf{u}_h\|_0 \|\mathbf{w}\|_0 \right) + \\ &\quad + C_1 \|\pi_h\|_0^2 - C_2 \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\pi_h\|_0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\geq -2C_\mu (\|\nabla_\Gamma \mathbf{u}_h\|_0 \|\nabla_\Gamma \mathbf{w}\|_0) + C_1 \|\pi_h\|_0^2 - C_2 \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\pi_h\|_0 \\
 &\geq -2C_\mu C_s (\|\nabla_\Gamma \mathbf{u}_h\|_0 \|\pi_h\|_0) + C_1 \|\pi_h\|_0^2 \\
 &\quad - C_2 \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\pi_h\|_0 \\
 &\geq -\frac{C_\mu C_s}{\epsilon} \|\nabla_\Gamma \mathbf{u}_h\|_0^2 + \left(C_1 - \epsilon C_\mu C_s - \frac{C_2 \epsilon}{2} \right) \|\pi_h\|_0^2 \\
 &\quad - \frac{C_2 \epsilon}{2} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right) \\
 &\geq -C_3 \|\nabla_\Gamma \mathbf{u}_h\|_0^2 + C_4 \|\pi_h\|_0^2 - C_5 \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right) \\
 &\geq -C_3 \|\mathbf{u}_h\|_1^2 + C_4 \|\pi_h\|_0^2 - C_5 \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \right), \tag{2.83}
 \end{aligned}$$

em que ϵ é proveniente da desigualdade de Young

$$xy \leq \frac{x^2}{2\epsilon} + \frac{\epsilon y^2}{2} \quad \forall x, y \in \mathbb{R} \quad \text{e} \quad \forall \epsilon \in \mathbb{R}, \epsilon > 0 \tag{2.84}$$

e é ao final escolhido tal que

$$0 < \epsilon < \frac{2C_1}{C_2 + 2C_\mu C_s}. \tag{2.85}$$

Seja agora $(\mathbf{v}, \xi) \doteq (\mathbf{u}_h - \delta \mathbf{w}, -\pi_h)$. De (2.84) e (2.80) resulta

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{v}, \xi) &= \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{u}_h - \delta \mathbf{w}, -\pi_h) \\
 \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{v}, \xi) &= \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{u}_h, -\pi_h) - \delta \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; -\mathbf{w}, 0) \\
 &\geq (C_\alpha - \delta C_3) \|\mathbf{u}_h\|_1^2 + \delta C_4 \|\pi_h\|_0^2 + (C_\alpha - \delta C_5) \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \|\nabla_\Gamma \pi_h\|_{0,K}^2 \\
 &\geq C_7 \left(\|\mathbf{u}_h\|_1^2 + \|\pi_h\|_0^2 \right), \tag{2.86}
 \end{aligned}$$

em que δ satisfaz

$$0 < \delta < \min \left\{ \frac{C_\alpha}{C_3}, \frac{C_\alpha}{C_5} \right\}. \quad (2.87)$$

Assim, respectivamente de (2.86), (2.79) e de (2.82),

$$\begin{aligned} \frac{\mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{v}, \xi)}{\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0} &\geq \frac{C_7 (\|\mathbf{u}_h\|_1^2 + \|\pi_h\|_0^2)}{\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0} \\ &\geq \frac{C_7 (\|\mathbf{u}_h\|_1^2 + \|\pi_h\|_0^2)}{C_0 (\|\mathbf{u}_h\|_1 + \|\pi_h\|_0)} \\ &\geq \frac{C_7 (\|\mathbf{u}_h\|_1 + \|\pi_h\|_0)^2}{2 C_0 (\|\mathbf{u}_h\|_1 + \|\pi_h\|_0)} \\ &\geq \beta (\|\mathbf{u}_h\|_1 + \|\pi_h\|_0), \end{aligned} \quad (2.88)$$

de onde segue a estabilidade. ■

Agora estabeleceremos a convergência de (BS-FVED).

Teorema 2.4.7. *Seja h o menor tamanho de passo de malha. Sob a hipótese de que valem as desigualdades de Poincaré (Teorema 2.4.1), do tipo Korn (Hipótese 2.4.2) e inversa (Hipótese 2.4.3) resulta*

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{u}_h, \pi_h)\|_{V \times Q} &\leq \left(1 + \frac{N_{\mathfrak{B}_h}}{\beta}\right) \inf_{\mathbf{v}_h, \xi_h} \left\{ \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} \right\} + \frac{\alpha C_1}{\beta} h \|\nabla_\Gamma \pi\|_0 \\ &\quad \forall (\mathbf{v}_h, \xi_h) \in V_h \times Q_h \end{aligned} \quad (2.89)$$

Demonstração. De imediato, segue que (2.72) não resulta em uma aproximação consistente pois

$$\mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h, \pi_h; \mathbf{v}, \xi) = \mathfrak{B}_h(\mathbf{u}, \pi; \mathbf{v}, \xi) - \alpha \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K h_K^2 \nabla_\Gamma \pi \cdot \nabla_\Gamma \xi. \quad (2.90)$$

Seja como for, pela desigualdade triangular,

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{u}_h, \pi_h)\|_{V \times Q} &= \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h) + (\mathbf{v}_h, \xi_h) - (\mathbf{u}_h, \pi_h)\|_{V \times Q} \\ &\leq \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\| + \|(\mathbf{v}_h, \xi_h) - (\mathbf{u}_h, \pi_h)\|_{V \times Q}. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Ademais, de (2.90) resulta

$$\|(\mathbf{u}_h, \pi_h) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} \leq \frac{1}{\beta} \sup_{(\mathbf{v}, \xi) \neq (0,0)} \frac{\mathfrak{B}_h(\mathbf{u}_h - \mathbf{v}_h, \pi_h - \xi_h; \mathbf{v}, \xi)}{\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0}. \quad (2.92)$$

Substituindo (2.90) em seu segundo membro, da desigualdade inversa (Hipótese 2.4.3) e pondo $h \doteq \min_{K \in \mathcal{T}_h} h_K$ resulta

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{u}_h, \pi_h) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} &\leq \frac{1}{\beta} \sup_{(\mathbf{v}, \xi) \neq (0,0)} \frac{\mathfrak{B}_h(\mathbf{u} - \mathbf{v}_h, \pi - \xi_h; \mathbf{v}, \xi) - \alpha h^2 \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \pi \cdot \nabla_{\Gamma} \xi}{\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0} \\ &\leq \frac{1}{\beta} \sup_{(\mathbf{v}, \xi) \neq (0,0)} \frac{\mathfrak{B}_h(\mathbf{u} - \mathbf{v}_h, \pi - \xi_h; \mathbf{v}, \xi) + \alpha h^2 \|\nabla_{\Gamma} \pi \cdot \nabla_{\Gamma} \xi\|_0^2}{\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0} \\ &\leq \frac{N_{\mathfrak{B}_h}}{\beta} \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} + \frac{\alpha h^2}{\beta} \sup_{(\mathbf{v}, \xi) \neq (0,0)} \frac{\|\nabla_{\Gamma} \pi \cdot \nabla_{\Gamma} \xi\|_0^2}{\|\mathbf{v}\|_1 + \|\xi\|_0} \\ &\leq \frac{N_{\mathfrak{B}_h}}{\beta} \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} + \frac{\alpha h^2}{\beta} \sup_{\xi \neq 0} \frac{\|\nabla_{\Gamma} \pi \cdot \nabla_{\Gamma} \xi\|_0^2}{\|\xi\|_0} \\ &\leq \frac{N_{\mathfrak{B}_h}}{\beta} \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} + \frac{\alpha h^2}{\beta} \sup_{\xi \neq 0} \frac{\|\nabla_{\Gamma} \pi\|_0 \|\nabla_{\Gamma} \xi\|_0}{\|\xi\|_0} \\ &\leq \frac{N_{\mathfrak{B}_h}}{\beta} \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} + \frac{\alpha h^2}{\beta} \|\nabla_{\Gamma} \pi\|_0 \sup_{\xi \neq 0} \frac{\|\nabla_{\Gamma} \xi\|_0}{\|\xi\|_0} \\ &\leq \frac{N_{\mathfrak{B}_h}}{\beta} \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} + \frac{\alpha h C_1}{\beta} \|\nabla_{\Gamma} \pi\|_0, \quad \forall (\mathbf{v}_h, \xi_h) \in V_h \times Q_h \end{aligned} \quad (2.93)$$

em que $N_{\mathfrak{B}_h}$ advém da continuidade de $\mathfrak{B}_h$. De (2.91) e (2.93),

$$\|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{u}_h, \pi_h)\|_{V \times Q} \leq \left(1 + \frac{N_{\mathfrak{B}_h}}{\beta}\right) \|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q} + \frac{\alpha C_1}{\beta} h \|\nabla_{\Gamma} \pi\|_0, \quad (2.94)$$

Tomando $\mathbf{v}_h$ como a interpolada de Lagrange de $\mathbf{u} \in H^2(\Gamma)$ e ξ_h como a interpolada de Clément de $\pi \in H^1(\Gamma)$ (ver Hipótese 2.4.4), segue que $\|(\mathbf{u}, \pi) - (\mathbf{v}_h, \xi_h)\|_{V \times Q}$ e $\|\nabla_{\Gamma} \pi\|_0$ são ambos de ordem $\mathcal{O}(h)$ em (2.94), resultando em convergência de ordem $\mathcal{O}(h)$. ■

Até agora consideramos apenas um único instante de tempo no qual a membrana viscosa é descrita por Γ . Como resultado de que o problema dependente do tempo constitui-se de fato pelo campo de velocidade sob o qual a membrana está se movendo, somos levados a definir o seguinte problema de evolução temporal:

Dado $\Gamma(0)$, computar a família de superfícies $\Gamma(t)$ que evoluem a partir de $\Gamma(0)$ advectadas pelo campo de velocidade $\mathbf{u}(t) : \Gamma(t) \rightarrow \mathbb{R}^3$ solução de (BS-FV). Matematicamente, a família

$\Gamma(t)$ deve satisfazer

$$d(\mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \Delta t, \Gamma(t + \Delta t)) \leq C \Delta t^2, \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma(t), \quad (2.95)$$

em que $C > 0$ é constante e $d(\cdot, \cdot)$ denota a (menor) distância entre um ponto e a superfície em questão.

2.4.3. Discretização espaço-temporal do problema de Boussinesq-Scriven

Como já dissemos, a discretização espacial consiste em uma triangulação de Γ , uma superfície fechada, orientável, de classe C^2 e sem borda. À conectividade de malha fixa, a superfície discreta Γ_h é então unicamente descrita por um vetor¹² de posições nodais $\underline{\mathbf{X}}$.

O tempo é discretizado de modo a computar uma sequência de superfícies triangularizadas $\Gamma^0, \Gamma^1, \dots, \Gamma^k$ que correspondem as posições nodais $\underline{\mathbf{X}}^0, \underline{\mathbf{X}}^1, \dots, \underline{\mathbf{X}}^k$. Para cada Γ^n , $n = 0, 1, \dots, k$, definimos o seguinte espaço de elementos finitos linear por partes

$$P_1^n \doteq \left\{ f \in C^0(\Gamma^n) ; f|_K \text{ é afim em cada triângulo } K \text{ em } \Gamma^n \right\}, \quad (2.96)$$

e, por intermédio dele, os seguintes espaços de aproximação para velocidade e pressão

$$V_h^n = (P_1^n)^3 - R, \quad (2.97)$$

$$Q_h^n = P_1^n, \quad (2.98)$$

em que (2.98) indica o espaço quociente entre $(P_1^n)^3$ e R , sendo este último o espaço de movimentos rígidos infinitesimais dado por

$$R \doteq \{ \mathbf{w} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{w}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^3 \}. \quad (2.99)$$

A malha é atualizada lagrangianamente. Denotando por J cada posição nodal e definindo $(\Delta t)_n \doteq t_{n+1} - t_n$ resulta

$$\mathbf{X}^{J,n+1} = \mathbf{X}^{J,n} + (\Delta t)_n \mathbf{u}_h^{n+1}. \quad (2.100)$$

Notar que (2.100) satisfaz (2.95) por construção, e que o campo de velocidade $\mathbf{u}_h^{n+1}$ é função de $(\mathbf{X}^{J,n})$ e então está definido em Γ^n (i.e., $\mathbf{u}_h^{n+1} \in V_h^n$).

Por fim, o problema linear discreto no espaço e no tempo a ser resolvido é:

¹²Trata-se de um vetor de vetores; cada nó possui três coordenadas espaciais cartesianas e $\underline{\mathbf{X}}$ é a lista nodalmente ordenada que os contém.

Encontrar $(\mathbf{u}_h^{n+1}, \pi_h^{n+1}) \in V_h^n \times Q_h^n$ tal que

$$(BS-FVD) \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Gamma^n} 2\mu D_{\Gamma} \mathbf{u}_h^{n+1} : D_{\Gamma} \mathbf{v} - \int_{\Gamma^n} \pi_h^{n+1} \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v} = \int_{\Gamma^n} \mathbf{f}_{\Gamma}^{n+1} \cdot \mathbf{v} \quad \forall \mathbf{v} \in V_h^n, \\ \int_{\Gamma^n} \xi \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u}_h^{n+1} + \int_{\Gamma^n} \gamma_h (\nabla_{\Gamma} \pi_h^{n+1} - \mathbf{g}_h^n) \cdot \nabla_{\Gamma} \xi = 0 \quad \forall \xi \in Q_h^n. \end{array} \right. \quad (2.101)$$

À (BS-FVD), várias observações pertinentes:

- As integrais são avaliadas em Γ^n , a qual é conhecida. Já superfície discreta Γ^{n+1} é obtida via (2.100). De modo a considerar remalhagem, o passo de tempo $(\Delta t)_n$ é adaptativo (possivelmente variável) e dependente do tamanho de malha¹³.
- A utilização de elementos finitos lineares de Lagrange para aproximar tanto a velocidade como a pressão superficiais demanda o uso de estabilização (pelo menos em (2.102)). Propomos fazê-lo pelo método SPGP, como apropriadamente descrito na sub-seção *Estabilização por gradiente de pressão*. Naturalmente, ao tratarmos de resolver problemas de evolução temporal, resolvemos (BS-FVD) a cada passo de tempo. Para não aumentar o custo computacional da solução, optamos por um tratamento explícito da projeção do gradiente de pressão, ou seja,

$$\int_{\Gamma^n} \mathbf{g}_h^n \cdot \mathbf{w} d\Gamma^n = \int_{\Gamma^n} \nabla_{\Gamma} \pi_h^n \cdot \mathbf{w} d\Gamma^n \quad \forall \mathbf{w} \in (Q_h^n)^3. \quad (2.103)$$

Em (2.102), o peso de estabilização γ_h varia de elemento a elemento segundo a equação

$$\gamma_h \doteq \frac{d_K^2}{10\mu}, \quad (2.104)$$

sendo d_K o diâmetro¹⁴ do elemento K . Mais à frente, na equação de momento, as forças elásticas serão consideradas explicitamente¹⁵, pelo que deliberamos somente pela estabilização da equação de incompressibilidade. A equação de momento passa a ter grande complexidade quando as forças elásticas são explicitadas, inviabilizando a estabilização na Sub-seção 2.1.1.

- O espaço V_h^n inclui movimentos rígidos. Eles poderiam ser filtrados considerando-se a adição de um termo do tipo

$$\int_{\Gamma^n} \beta \mathbf{u}_h^{n+1} \cdot \mathbf{v} d\Gamma^n \quad (2.105)$$

¹³A remalhagem será descrita no Capítulo 4, onde a necessidade de seu uso ficará também clara.

¹⁴Raio da maior circunferência inscrita em K .

¹⁵Por enquanto, as forças elásticas estão “escondidas” em $\mathbf{f}_{\Gamma}$.

no primeiro membro de (2.101). Se fosse esse o caso, estaríamos adicionando uma matriz de massa¹⁶ à (2.101), a qual de fato também pode ser interpretada como uma inércia membranal ou como um termo de fricção ou amortecimento (até possivelmente representando alguma interação com o meio circundante).

Em vez de (2.105), preferimos eliminar exatamente os movimentos rígidos via multiplicadores de Lagrange. Para tanto, 6 equações e 6 incógnitas são adicionadas à matriz global. Elas advém de

$$\int_{\Gamma^n} \mathbf{u}_h^{n+1} d\Gamma^n = \mathbf{0} \quad (2.106)$$

e

$$\int_{\Gamma^n} \mathbf{x}^n \wedge \mathbf{u}_h^{n+1} d\Gamma^n = \mathbf{0}, \quad (2.107)$$

em que (2.106) elimina as translações e (2.107) as rotações. O símbolo $\wedge$ denota o produto vetorial usual.

Em (BS-FVD) não explicitamos as forças elásticas em Γ . Disso nos ocuparemos ao discutir como é a energia configuracional elástica $\mathcal{E}(\Gamma)$ e sua derivada de forma $d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v})$ no próximo capítulo. Só então teremos os ingredientes necessários para apresentar nossa proposta final de um tratamento numérico para a mecânica das interfaces lipídicas.

¹⁶Assim ela é chamada no jargão de elementos finitos.

On ne trouvera point de Figures dans cet Ouvrage. Les méthodes que j'y expose ne demandent ni construction, ni raisonnemens géométriques, ou mécaniques, mais seulement des opérations algébriques, assujetties à une marche régulière & uniforme. Ceux qui aiment l'Analyse, verront avec plaisir la Méchanique en devenir une nouvelle branche, & me fauront gré d'en avoir étendu ainsi le domaine.

Joseph L. Lagrange, *Méchanique Analytique*

Capítulo

3

Energia configuracional membranal

Antes de tratar da dinâmica morfológica, é preciso estabelecer como é a força elástica que advém da rigidez de curvatura que as membranas lipídicas possuem. Ainda, à esse respeito: porque as membranas das células existentes na natureza (leia-se também lipossomas) adquirem certas configurações geométricas (e não outras)? Como veremos, suas geometrias estáveis são mínimos locais de uma certa energia de curvatura membranal.

3.1. Energia de Canham-Helfrich

Da ideia de que a flexão de Γ ocorre às custas de energia, Canham (1970)¹ e Helfrich (1973) propuseram a seguinte densidade superficial de energia livre²

$$\psi \doteq \frac{c_{\text{CH}}}{2}(\kappa - \kappa_0)^2 + c_{\text{G}}K, \quad (3.1)$$

em que c_{CH} e c_{G} são a rigidez ordinária e gaussiana, respectivamente. Já o parâmetro κ_0 representa uma possível curvatura “espontânea”, que pode ser positiva ou negativa, a depender da composição química membranal (Kamal *et al.*, 2009) ou de diferenças químicas entre os meios interior e exterior (Döbereiner *et al.*, 1999). Para as bicamadas lipídicas de membranas celulares formadas de fosfatidilcolina, a curvatura espontânea é nula (Dickey & Faller, 2008; Lee, 2011). Assim, em primeira instância consideraremos que $\kappa_0 \equiv 0$.

¹A motivação de Canham (1970) era explicar a forma bicôncava que as hemácias possuem. Mesmo sem levar em conta o citoesqueleto, de fato ele alcançou seu objetivo.

²Uma nota histórica: se por um lado a energia de Canham-Helfrich já houvera sido proposta na teoria de cascas elásticas (Poisson, 1812; Germain, 1921), sua derivação microfísica em âmbito de primeiros princípios foi obtida apenas recentemente modelando-se cada molécula lipídica como uma haste rígida unidimensional (Seguin & Fried, 2014).

Em termos totais, se c_{CH} e c_{G} são constantes, a integral de superfície de (3.1) produz

$$\mathcal{E}(\Gamma) = \frac{c_{\text{CH}}}{2} \oint_{\Gamma} \kappa^2 d\Gamma + c_{\text{G}} \oint_{\Gamma} K d\Gamma. \quad (3.2)$$

Se Γ é uma superfície cujo gênero g mantém-se fixo, utilizando-se do Teorema de Gauss-Bonnet (enunciado no Apêndice C) (3.2) torna-se³

$$\mathcal{E}(\Gamma) = \frac{c_{\text{CH}}}{2} \oint_{\Gamma} \kappa^2 d\Gamma, \quad (3.3)$$

a qual (sem a constante $\frac{c_{\text{CH}}}{2}$) é chamada em geometria diferencial de energia de Willmore (Willmore, 1993). Além da óbvia invariância com respeito a movimentos rígidos, $\mathcal{E}(\Gamma)$ é invariante sob transformações de escala: dada uma superfície $\tilde{\Gamma}$ de curvatura $\tilde{\kappa} = \kappa/\alpha$, $\alpha \in \mathbb{R}_{\neq 0}$, resulta ser $\mathcal{E}(\tilde{\Gamma}) = \mathcal{E}(\Gamma)$. De modo menos evidente, a energia de Willmore é invariante também sob inversões. Em suma, portanto, ela é invariante sob transformações-conforme⁴ (*i.e.*, transformações que preservam ângulos localmente). À considerar de fato suas variações, aproveitaremos o ensejo para introduzir a ideia de força de curvatura.

A derivada de forma (*shape derivative*) de um funcional $\mathcal{J}(\Gamma)$ na direção de um campo virtual $\mathbf{v}$ é definida como

$$d\mathcal{J}(\Gamma, \mathbf{v}) \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{J}(\Gamma + \epsilon \mathbf{v}) - \mathcal{J}(\Gamma)}{\epsilon}, \quad (3.4)$$

em que, abusando da notação, $\Gamma + \epsilon \mathbf{v} \doteq \{\mathbf{x} + \epsilon \mathbf{v}, \mathbf{x} \in \Gamma\}$. Em particular, para a energia de Canham-Helfrich,

$$d\mathcal{E}(\Gamma, v_{\tilde{\mathbf{n}}}) = c_{\text{CH}} \int_{\Gamma} \left(\nabla_{\Gamma} \kappa \cdot \nabla_{\Gamma} v_{\tilde{\mathbf{n}}} - \frac{1}{2} \kappa^3 v_{\tilde{\mathbf{n}}} + 2K\kappa v_{\tilde{\mathbf{n}}} \right) d\Gamma, \quad (3.5)$$

com $v_{\tilde{\mathbf{n}}} \doteq \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{n}}$ sendo a componente normal de $\mathbf{v}$ e $\tilde{\mathbf{n}}$ sendo a normal exterior a Γ (Bonito *et al.*, 2010).

Seja χ a função identidade sobre Γ . Alternativamente a (3.5), na qual somente $v_{\tilde{\mathbf{n}}}$ aparece no cômputo de $d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v})$, Rusu (2005) derivou que

$$d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) = c_{\text{CH}} \int_{\Gamma} \left[\frac{|\Delta_{\Gamma} \chi|^2}{2} \nabla_{\Gamma} \chi : \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} + \nabla_{\Gamma} (\Delta_{\Gamma} \chi) : \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} - 2(\nabla_{\Gamma} (\Delta_{\Gamma} \chi)^T \tilde{\mathbf{n}}) \cdot (\nabla_{\Gamma} \mathbf{v}^T \tilde{\mathbf{n}}) \right] d\Gamma. \quad (3.6)$$

³Sem perda de generalidade, supre-se o termo $4\pi(1-g)c_{\text{G}}$ em (3.3) pois este é uma *constante aditiva* e portanto não influencia na minimização do funcional de energia $\mathcal{E}$, $\mathcal{E} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$; para definição do gênero g de uma superfície, ver Apêndice C.

⁴Curiosidade histórica: segundo Marques & Neves (2014b), o próprio Willmore só tomou conhecimento desse fato após ler o artigo de White (1973).

Ainda, segundo Bonito *et al.* (2010)

$$d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) = c_{\text{CH}} \int_{\Gamma} \left[\nabla_{\Gamma} \mathbf{v} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} - \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} (\nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\chi} + \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\chi}^T) : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} (\nabla_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v}) \right] d\Gamma, \quad (3.7)$$

em que o vetor curvatura $\boldsymbol{\kappa}$ satisfaz a identidade de Laplace-Beltrami:

$$\boldsymbol{\kappa} \doteq \boldsymbol{\kappa} \tilde{\mathbf{n}} = -\Delta_{\Gamma} \boldsymbol{\chi}. \quad (3.8)$$

Sendo o projetor tangencial dado por $\mathbb{P} = \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\chi}$ (ver Lema A.16, Apêndice A), a equação (3.7) pode ser escrita como

$$d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) = c_{\text{CH}} \int_{\Gamma} \left[(\mathbb{I} - 2\mathbb{P}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} (\nabla_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v}) \right] d\Gamma. \quad (3.9)$$

A partir de (3.9) definimos a força de curvatura total $\mathcal{F}_{\mathbf{v}}$ a partir da seguinte equação variacional

$$\mathcal{F}_{\mathbf{v}} \doteq \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Gamma \doteq -d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}). \quad (3.10)$$

Observação 3.1.1. De (3.5) conclui-se que a força de curvatura se dá exclusivamente na direção normal. Movimentos tangenciais de Γ não alteram sua forma. Isto é menos evidente a partir de (3.9), a qual, aliás, foi obtida por Bonito *et al.* (2010) a partir de (3.5).

Uma vez definidas a energia e a força de curvatura, vamos às configurações de energia mínima.

3.1.1. Geometrias lipossomais de energia mínima

Pela sua concordância com a biologia experimental, não há dúvidas de que o modelo de Canham-Helfrich explica de modo bastante satisfatório as complexas formas que membranas lipídicas assumem (Seifert, 1997; Baumgart *et al.*, 2003). Em cada uma dessas formas de energia mínima, o desbalanço de forças normais é igual a zero⁵. A despeito disso, tais soluções não podem ser facilmente obtidas para membranas com geometria arbitrária, ainda que via métodos numéricos e mesmo sem se considerar a viscosidade membranal⁶. De fato, esta última possui real importância sobretudo em se tratando da evolução temporal. Seja como for, nos referimos a soluções de referência, cujo cômputo deve ser simples e direto, mas com uma precisão tal que possam ser consideradas como analíticas. A fim de fazê-lo de modo mais breve possível, tratamos de calcular soluções quasi-analíticas restringindo-nos ao caso em que a superfície Γ pode ser completamente descrita por meio de uma curva

⁵Embora na direção tangencial haja forças viscosas, lembremos que estas não alteram a energia de Canham-Helfrich.

⁶Embora seja relevante na dinâmica, a viscosidade membranal define apenas uma escala de tempo e portanto não influencia na estabilidade local das soluções de equilíbrio.

plana. Isso se dá somente em um dos seguintes casos: (a) Γ é uma superfície plana e a curva plana que a descreve é uma curva fechada; (b) Γ é uma superfície de revolução cuja geratriz é uma curva plana, que são formas bidimensionais (a) ou tridimensionais axissimétricas (b). Ambas situações são abordadas a seguir, não somente por serem soluções de referência, senão que com o propósito adicional de se discutir e ilustrar os aspectos da teoria. Em particular, a sub-sub-seção a seguir trata de um detalhamento e extensão de um de nossos resumos de anais de congresso (Tasso *et al.*, 2011).

Equilíbrios estáticos de formas bidimensionais

Na abordagem variacional de Veerapaneni *et al.* (2009), configurações bidimensionais membranais são determinadas pelo seguinte problema de minimização restrito: buscar a curva fechada $\gamma = \gamma(s)$ de comprimento ℓ e área delimitada $\mathcal{A}$ que minimize a lagrangiana

$$\mathcal{L} = \frac{c_{\text{CH}}}{2} \int_{\gamma} \kappa^2 ds + \sigma \left(\int_{\gamma} ds - \ell \right) + p \left(\int_{\gamma} \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \tilde{\mathbf{n}} ds - \mathcal{A} \right), \quad (3.11)$$

em que $\mathbf{x} \in \gamma$, $\tilde{\mathbf{n}}$ é a normal unitária (exterior), e a tensão superficial σ e a diferença de pressão interior/exterior p (ambas constantes) são os multiplicadores de Langrange associados respectivamente a ℓ e $\mathcal{A}$. À luz de (3.11), vale ressaltar que a membrana lipossomal é a própria curva γ e que, por conseguinte, $\mathcal{L}$ na verdade tem unidades de energia *por unidade de comprimento*. Ademais, γ é parametrizada por comprimento de arco, $\gamma(s) = (x(s), y(s))$.

Cada curva fechada γ possui um único valor de $\mathcal{L}$ que em princípio poderia depender separadamente dos valores $\mathcal{A}$ e ℓ . O que ocorre, porém, é uma dependência de uma quantidade adimensional denominada *área reduzida*, a saber

$$v_{2\text{D}} \doteq \frac{4\pi\mathcal{A}}{\ell^2}, \quad (3.12)$$

a qual é assim definida para resultar em valor máximo igual a 1 para um círculo qualquer.

Ao contrário do que mencionamos na Sub-seção 3.1 (caso em que a membrana é de fato uma *superfície*), $\mathcal{L}$ não é invariante por transformações de escala se a interface membranal é uma *curva*. De fato, pondo $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/\ell_0$, $\tilde{\kappa} = \ell_0 \kappa$, $\tilde{ds} = ds/\ell_0$ e substituindo-os em (3.11),

$$\mathcal{L} = \frac{c_{\text{CH}}}{\ell_0} \left[\frac{1}{2} \int_{\tilde{\gamma}} \tilde{\kappa}^2 \tilde{ds} + \ell_0^2 \sigma \left(\int_{\tilde{\gamma}} \tilde{ds} - \tilde{\ell} \right) + \ell_0^3 p \left(\int_{\tilde{\gamma}} \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{x}} \cdot \tilde{\mathbf{n}} \tilde{ds} - \tilde{\mathcal{A}} \right) \right], \quad (3.13)$$

de sorte que $\tilde{\sigma} = \ell_0^2 \sigma$, $\tilde{p} = \ell_0^3 p$ e $\tilde{\mathcal{L}} = (\ell_0/c_{\text{CH}}) \mathcal{L}$.

Ainda, a derivada de $\mathcal{L}$ com respeito a s fornece a força total sobre a membrana, esta por sua vez composta pela força de curvatura $\mathbf{f}_{\kappa} = c_{\text{CH}} (\kappa'' + \kappa^3/2) \tilde{\mathbf{n}}$, de tensão superficial $\mathbf{f}_{\sigma} = -\sigma \kappa \tilde{\mathbf{n}}$, e de pressão $\mathbf{f}_p = p \tilde{\mathbf{n}}$. Como o desbalanço de forças é zero nas formas de

equilíbrio de energia mínima, resulta

$$c_{\text{CH}} \left(\kappa'' + \frac{\kappa^3}{2} \right) - \sigma \kappa + p = 0, \quad (3.14)$$

em que κ' denota a derivada de κ com relação à s .

Diferentemente da abordagem de problema de minimização empregada por Veerapanni *et al.* (2009), para resolvermos a equação de equilíbrio de forças (3.14) consideramos que σ e p são parâmetros físicos conhecidos que determinam o comprimento ℓ e a área $\mathcal{A}$ da forma membranal bidimensional (e não o contrário). Aliás, todas as curvas em nossos resultados foram re-escaladas de modo que seu comprimento passasse a ser igual a π . Naturalmente, as quantidades $\mathcal{L}$, σ , p e $\kappa(0)$ também tiveram seus valores alterados segundo os adimensionais definidos ao apresentar (3.13).

De modo a obter a curva $\gamma(s) = (x(s), y(s))$ precisamos relacionar $\kappa(s)$ com $x(s)$ e $y(s)$. Isso é feito detalhadamente no Apêndice D.1, onde por fim apresentamos o sistema de equações a ser resolvido e os pormenores de sua solução numérica.

Quanto aos resultados, na Figura 3.1 exibimos três configurações de energia mínima, de dois, três e quatro lóbulos, todas com silhuetas de comprimento igual a π . As quantidades resultantes ℓ , $\mathcal{A}$, v_{2D} e $\mathcal{L}$ dessas formas de energia mínima são apresentados na Tabela 3.1 (σ , p e $\kappa(0)$ são conhecidos *a priori* e, sem perda de generalidade, $c_{\text{CH}} = 1$). Para comparação, um círculo de raio 0.5 é também exibido, cuja circunferência de fato minimiza o funcional de energia $\mathcal{L}$. De acordo com as duas últimas linhas da Tabela 3.1, convém ressaltar que nem sempre $\mathcal{L}$ cresce à medida que v_{2D} diminui. Isso porque o aspecto geométrico de uma dada forma de energia mínima pode mudar à medida que a área reduzida se altera (no caso exemplificado, passa a não ter mais 3, senão que 4 lóbulos). Essas configurações são mínimos *locais*, pelo que não se exclui a possibilidade de existirem outras configurações de energia mínima.

Tabela 3.1: Dados das configurações lipossomais bidimensionais de energia mínima da Figura 3.1. A primeira linha corresponde a uma círculo de raio igual a 0.5.

# lóbulos	ℓ	$\mathcal{A}$	v_{2D}	$\mathcal{L}$	σ	p	$\kappa(0)$
–	π	7.8540E–01	1.0000E+00	6.2832E+00	+5.0000E+00	+6.0000E+00	+2.0000E+00
2	π	4.3730E–01	5.5679E–01	1.6088E+01	–3.7361E+00	–3.2295E+01	–1.1237E+00
3	π	3.2075E–01	4.0839E–01	4.6747E+01	–6.8482E+00	–1.1334E+02	–4.4248E+00
4	π	3.6637E–01	4.6647E–01	7.3790E+01	–2.1924E+01	–2.0531E+02	–6.6137E+00

Para além das formas bidimensionais de energia mínima, uma abordagem mais próxima à realidade física e biológica se dá em âmbito *tridimensional*, cujo caso axissimétrico abordamos a seguir.

Figura 3.1: Configurações lipossomais bidimensionais de energia mínima (à $c_{\text{CH}} = 1$ e dados da Tabela 3.1).

Equilíbrios estáticos de formas tridimensionais axissimétricas

Em se tratando de simetria de revolução, a equação de equilíbrio de forças normais é dada pela versão diferencial de (3.10), a saber

$$c_{\text{CH}} \left(\kappa'' + \frac{\kappa^3}{2} \right) - 2 c_{\text{CH}} \kappa K - \sigma \kappa + p = 0, \quad (3.15)$$

com o ingrediente adicional de que a membrana está sujeita à uma tensão superficial σ *fixa* e em um meio circundante à pressão p *constante* (cuja respectivas forças também se dão somente na direção normal).

Não mais em duas dimensões espaciais, senão que em 3D, a energia de Canham-Helfrich é função do volume reduzido⁷

$$v_{\text{3D}} = \frac{6\sqrt{\pi} \mathcal{V}}{\mathcal{A}^{3/2}}, \quad (3.16)$$

em que $\mathcal{V}$ denota o volume interior à membrana.

Como antes, a descrição completa da obtenção das formas de energia mínima (agora tridimensionais axissimétricas) é apresentada ao final da tese (Apêndice D.2). Também como anteriormente, σ , p e $\kappa(0)$ são impostos. Para comparação, as curvas-solução são apresentadas em sua forma re-escalada, mas agora de modo que a área por elas delimitada passasse a valer 4π . Os fatores de escala são idênticos àqueles do caso bidimensional – exceto pela energia de Canham-Helfrich, que agora volta a ser invariante sob escala.

Na Figura 3.2 exibimos duas formas oblatas no caso em que $c_{\text{CH}} = 1$. A semelhança da

⁷Por convenção, o *volume reduzido* é igual a 1 para uma esfera qualquer.

forma mais côncava com a seção transversal de uma hemácia não é mera coincidência. Uma hemácia humana a valores típicos⁸ de área superficial $\mathcal{A} = 1.36 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ (Udroiu, 2014) e volume $\mathcal{V} = 9.0 \times 10^{-17} \text{ m}^3$ (Turgeon, 2011) possui volume reduzido de 0.60348, valor este próximo ao $v_{3D} = 0.61047$ da forma de concavidade mais acentuada, de onde então se dá a similaridade bicôncava.

Figura 3.2: Vista em corte transversal de configurações lipossomais tridimensionais axissimétricas de energia mínima (à $c_{CH} = 1$). A forma de maior concavidade é aquela com menor valor de v_{3D} na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Dados das configurações lipossomais tridimensionais axissimétricas de energia mínima da Figura 3.2. A primeira linha corresponde a uma esfera de raio igual a 2.0.

$\mathcal{A}$	$\mathcal{V}$	v_{3D}	$\mathcal{E}$	σ	p	$\kappa(0)$
4π	4.1888E+00	1.0000E+00	2.5133E+01	+1.0000E+00	5.0000E-01	1.0000E+00
4π	3.3937E+00	8.1018E-01	3.5896E+01	-5.8296E+00	3.2331E+01	7.6346E-01
4π	2.5571E+00	6.1047E-01	4.8469E+01	-4.7653E+00	1.5008E+01	2.1829E+00

De modo mais criterioso do que nossa simples comparação de valores de volume reduzido, Deuling & Helfrich (1976) apresentam uma verdadeira validação do modelo de Canham-Helfrich, como sempre aplicando-o ao ajuste de forma das membranas plasmáticas de hemácias. Minuciosamente, formas de mínima energia foram ajustadas a silhuetas

⁸Valores de referência, pois há dependência da idade do indivíduo, idade da hemácia, tonicidade da solução na qual as hemácias estão imersas, etc. Ademais, não há consenso entre os valores encontrados na literatura. Por exemplo, segundo Evans & Fung (1972) $\mathcal{A} = 1.35 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ e $\mathcal{V} = 9.4 \times 10^{-17} \text{ m}^3$, o que resulta em $v_{3D} = 0.63731$.

experimentais de hemácias de origem humana⁹, sendo justamente a curvatura espontânea κ_0 o único parâmetro livre. Por sinal, $\kappa_0 = 0$ resultou em um ajuste de baixa concordância com os experimentos. Para geometrias de energia mínima de *hemácias* é então mandatório considerar $\kappa_0 \neq 0$. Não obstante, é válida a crítica de que o citoesqueleto não foi considerado por Deuling & Helfrich (1976). Para membranas *lipídicas* em geral, por outro lado, não obrigatoriamente $\kappa_0 \neq 0$ (como ora dissemos, $\kappa_0 = 0$ no caso das membranas de fosfatidilcolina).

3.2. Superfícies de evolução

Especialmente aqui nesse capítulo, e em concordância com a literatura, referimo-nos à escoamento em um sentido amplo, lato (já que estamos abordando superfícies não-viscosas). De modo geral, problemas de superfícies de evolução consistem em prescrever uma certa velocidade superficial em termos de quantidades geométricas da superfície. O que as define é a aplicação, a modelagem à qual a superfície se presta. Seja como for, em termos abstratos, qualquer problema de superfície de evolução pode ser posto na seguinte forma

$$\mathfrak{D}(\mathbf{u}) = \mathbf{g}(\tilde{\mathbf{n}}, \kappa, K, \dots), \quad (3.17)$$

em que $\mathfrak{D}(\cdot)$ é um operador que age sobre a velocidade superficial $\mathbf{u}$ e $\mathbf{g}(\cdot)$ é uma certa função de algum invariante geométrico de Γ . Em problemas contínuos, eles supostamente são conhecidos, mas do ponto de vista numérico, eles têm que ser computados a partir de uma superfície discreta – o que nem sempre é trivial. Vejamos alguns exemplos.

Duas situações relevantes são (Bänsch *et al.*, 2005; Deckelnick *et al.*, 2005):

$$\mathbf{u} \propto -\kappa \tilde{\mathbf{n}}, \quad (\text{escoamento curvatura média}) \quad (3.18)$$

$$\mathbf{u} \propto (\Delta_\Gamma \kappa) \tilde{\mathbf{n}}. \quad (\text{difusão superficial}) \quad (3.19)$$

De nosso interesse em especial, há ainda o problema de evolução de uma *membrana com rigidez de curvatura* (Bonito *et al.*, 2010):

$$\beta \mathbf{u} = c_{\text{CH}} \left(\Delta_\Gamma \kappa + \frac{1}{2} \kappa^3 - 2 \kappa K \right) \tilde{\mathbf{n}}. \quad (3.20)$$

O segundo membro de (3.20) é exatamente a versão “forte” da equação variacional (3.10), e é a força de curvatura de Canham-Helfrich. O parâmetro β surge para tornar a igualdade dimensionalmente consistente ($\beta \mathbf{u}$ tem unidades de força).

O primeiro membro de (3.20) pode ser interpretado como um amortecimento *viscoso* pondo $\beta = -\mu$. Verdadeiramente, ele modela uma superfície com rigidez de curvatura, pois

⁹Conferir Evans (1971), Evans & Fung (1972) e Evans & Leblond (1973). Para o contorno, por ocasião da microscopia de interferência foram considerados até mesmo efeitos de difração.

o *amortecimento* viscoso se dá apenas na direção normal. Notar que (3.18) e (3.19) não dizem respeito à superfícies viscosas.

Nesses três exemplos de superfícies de evolução há somente forças normais. Como elas são proporcionais a $\mathbf{u}$, acabam por gerar respectivos campos de velocidade apenas normais. Este não é o caso se o operador $\mathfrak{D}(\mathbf{u})$ em (3.17) é o operador de Boussinesq-Scriven. Isso já foi detalhado no Capítulo 2, e então aqui nos dedicamos às diferentes escolhas e tratamentos numéricos para $\mathbf{g}(\cdot)$ em (3.17) – sobretudo os que dizem respeito à força de curvatura de Canham-Helfrich.

3.2.1. Escoamento de Willmore

De fato, (3.20) representa um escoamento de Willmore. Vamos clarificar o porquê disso adotando um outro ponto de vista. O que se segue vale também para casos nos quais Γ é uma superfície d -dimensional imersa em $\mathbb{R}^{d+1}$, mas por facilidade trataremos apenas do caso $d = 2$.

O escoamento de Willmore é o escoamento gradiente L^2 do funcional de Willmore

$$\mathcal{W}(X) = \oint_{\Gamma(t)} \kappa^2 d\Gamma, \quad (3.21)$$

em que X é uma parametrização local $X : D \rightarrow \Gamma$ em $\mathbb{R}^3$ com par de parâmetros $(\theta_1, \theta_2) \doteq \Theta$ em um domínio paramétrico $D \subset \mathbb{R}^2$. A equação (3.21) já foi apresentada em (3.3).

Dada uma superfície inicial $\Gamma(0)$, a forma variacional do problema de escoamento de Willmore é *encontrar superfícies $\Gamma(t)$ para $t \in [0, T]$ com $\Gamma_0 = \Gamma(0)$ que satisfaçam*

$$\left\langle \beta \frac{\partial}{\partial t} \chi(X(\Theta)), \phi \right\rangle_{L^2} = -d\mathcal{W}(X, \phi) \quad \forall \phi \in V, \quad (3.22)$$

em que, assim como antes, $d\mathcal{W}(X, \phi)$ denota a derivada de forma de $\mathcal{W}(X)$ na direção do campo ϕ . Assim, dados o produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2}$ e o “gradiente” $d\mathcal{W}(X, \phi)$ fica justificada a terminologia *escoamento gradiente L^2* . Em suma, (3.22) significa que Γ escoar na direção de maior descida de $\mathcal{W}(X)$, isto é, na direção $-d\mathcal{W}(X, \phi)$.

Quanto ao método dos elementos finitos em problemas do escoamento de Willmore, citamos o artigo de Dziuk (2008). Nele, o autor propõe um novo método numérico e apresenta sua análise de consistência e estabilidade. Para solução numérica de EDPs elípticas lineares em superfícies citamos (Dziuk, 1988, 1991), e (Dziuk & Elliott, 2006) para sua extensão a EDPs parabólicas lineares em superfícies de evolução.

3.2.2. Força elástica e curvaturas discretas

Pois bem, desejamos tratar de membranas com rigidez de curvatura. Dinamicamente, essa rigidez se traduz em uma força elástica, em uma força de curvatura exatamente tal como

aquela disposta no segundo membro de (3.20). Em (3.10) há possibilidade de se usar a força de curvatura em sua forma escalar (3.5) ou vetorial (3.9). Cada uma delas define como a solução numérica deve se dar. Seja como for, sobretudo em malhas superficiais de triângulos lineares por partes (*i.e.*, de classe C^0), os análogos *discretos* de $\tilde{\mathbf{n}}$, $\boldsymbol{\kappa}$, κ e K não são trivialmente estendidos ou até mesmo definidos a partir dessas respectivas quantidades discretas. Há alternativas tais como as *subdivision surfaces* de classe C^1 (Feng & Klug, 2006). Contudo, sua implementação não é tão simples e direta como no caso das superfícies de classe C^0 .

Do ponto de vista numérico, a força de curvatura em sua forma *escalar* é bastante inconveniente. Vários passos intermediários tem que ser feitos e a força só pode ser tratada de modo explícito. Notar que se (3.5) é utilizada para se calcular a força de curvatura, κ_h e K_h tem que ser computadas de antemão (ao tempo n), pois

$$\int_{\Gamma^n} f_h^n \phi d\Gamma^n = -c_{CH} \int_{\Gamma^n} \left(\nabla_{\Gamma} \kappa_h^n \cdot \nabla_{\Gamma} \phi - \frac{1}{2} (\kappa_h^n)^3 \phi + 2 K_h^n \kappa_h^n \phi \right) d\Gamma^n \quad (3.23)$$

$$\forall \phi \in \Phi_h.$$

Ocorre que as funções teste utilizadas na forma variacional do operador de Boussinesq-Scriven são *vetoriais* – ver (2.101), mas a força de Canham-Helfrich é escalar *em* (3.24). Um vetor normal discreto tem que ser calculado nodalmente¹⁰ para que o termo de força elástica

$$\int_{\Gamma^n} f_h^n \tilde{\mathbf{n}}_h \cdot \mathbf{v} d\Gamma \quad (3.24)$$

possa ser posto em um tratamento explícito em (2.101).

A obtenção de κ_h^n e K_h^n pode ser feita via métodos de geometria diferencial discreta. Também é possível utilizar a forma variacional da (3.8), a saber¹¹

$$\int_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\zeta} d\Gamma = \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\chi} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\zeta} d\Gamma \quad \forall \boldsymbol{\zeta} \in Z, \quad (3.25)$$

já que κ é o módulo do vetor $\boldsymbol{\kappa}$, em uma discretização por elementos finitos.

A primeira inconveniência é que o cômputo de κ_h e K_h são pouco robustos em se tratando de superfícies discretas de classe C^0 , seja por elementos finitos, seja pelos melhores métodos de geometria discreta disponíveis (Meyer *et al.*, 2002; Belkin *et al.*, 2008). De fato, a curvatura média discreta κ_h não converge na norma $\|\cdot\|_{0,2}$ se Γ_h é apenas de classe C^0 . Isso pois, segundo Heine (2004),

$$\|\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\kappa}_h\|_{0,2} \leq ch^{k-1}, \quad (3.26)$$

¹⁰Por exemplo, por intermédio de (3.25) e $\tilde{\mathbf{n}} = \boldsymbol{\kappa}/\kappa$.

¹¹A dedução é direta a partir de um resultado intermediário do Lema A.17 (Apêndice A).

em que c denota uma constante independente de h , e k é o grau do polinômio utilizando na triangulação de Γ para obter Γ_h . Sem abrir mão de triângulos lineares, esse problema pode ser amenizado “heurísticamente” estabilizando-se a equação (3.24) com um pequeno termo do tipo difusivo (sem garantias de convergência, no entanto).

Um método verdadeiramente consistente do ponto de vista numérico para cálculo de κ_h é dado por Dziuk (2008). Nele, o autor demonstra e verifica numericamente que em seu método a energia de Willmore é aproximada *quadraticamente* por triângulos *lineares*, mas que o simples uso de (3.25) resulta numa discretização *inconsistente* em superfícies C^0 . Na prática, o problema de se usar a proposta de Dziuk (2008) é que nela é necessário projetar, via espaços estendidos, pelo menos os baricentros de cada triângulo de Γ_h na superfície Γ , a qual geralmente é *desconhecida*.

Diante do exposto, a versão vetorial da derivada de forma de $\mathcal{E}(\Gamma)$, a saber

$$d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) = c_{\text{CH}} \int_{\Gamma} \left[(\mathbb{I} - 2\mathbb{P}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} (\nabla_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v}) \right] d\Gamma \quad (3.27)$$

é então mais adequada para a construção de uma formulação variacional discreta.

Como subproduto do cômputo da derivada de forma, aparece uma nova incógnita, $\boldsymbol{\kappa}$, que por sua vez está sujeita à “restrição” (3.25). Uma simples escolha para discretização temporal de (3.25) é

$$\int_{\Gamma^n} \boldsymbol{\kappa}_h^n \cdot \boldsymbol{\zeta} d\Gamma^n = \int_{\Gamma^n} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\chi}^n : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\zeta} d\Gamma^n \quad \forall \boldsymbol{\zeta} \in Z_h, \quad (3.28)$$

na qual *não está presente a velocidade da superfície* Γ . A quantidade $\boldsymbol{\kappa}_h^n$ proveniente de (3.28) poderia ser calculada de antemão por métodos de geometria diferencial discreta e então ser substituída em (3.27). Ocorre que essa escolha resulta ser numericamente instável, pois segundo (3.26) $\boldsymbol{\kappa}_h$ não é convergente em elementos lineares. Isso pode ser contornado buscando algum acoplamento entre $\boldsymbol{\kappa}_h$ e a velocidade $\mathbf{u}_h$ (proveniente de alguma equação para evolução) ou ainda por meio de alguma técnica de estabilização.

Os segundos membros das equações (3.25) e (3.28) parecem ser indiferentes à qualquer discretização temporal, mas o fato é que isso está implícito na função identidade $\boldsymbol{\chi}$.

Acoplamos $\boldsymbol{\kappa}_h$ e $\mathbf{u}_h$ a partir de

$$\int_{\Gamma^{n+1}} \boldsymbol{\kappa}_h^{n+1} \cdot \boldsymbol{\zeta} d\Gamma^{n+1} = \int_{\Gamma^{n+1}} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\chi}^{n+1} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\zeta} d\Gamma^{n+1} \quad \forall \boldsymbol{\zeta} \in Z_h, \quad (3.29)$$

pondo alguma “definição” ou interpretação adequada para $\boldsymbol{\chi}^{n+1}(\mathbf{x})$. A ideia é reescrever a atualização lagrangiana de malha – equação (2.100) – via função identidade

$$\boldsymbol{\chi}^{n+1}(\mathbf{x}) \doteq \boldsymbol{\chi}^n(\mathbf{x}) + (\Delta t)_n \mathbf{u}_h^{n+1}. \quad (3.30)$$

e, assim,

$$-(\Delta t)_n \int_{\Gamma^{n+1}} \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}_h^{n+1} : \nabla_{\Gamma} \zeta \, d\Gamma^{n+1} + \int_{\Gamma^{n+1}} \boldsymbol{\kappa}_h^{n+1} \cdot \zeta \, d\Gamma^{n+1} = \int_{\Gamma^{n+1}} \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\chi}^n : \nabla_{\Gamma} \zeta \, d\Gamma^{n+1} \quad \forall \zeta \in Z_h. \quad (3.31)$$

Ocorre que a superfície Γ^{n+1} é desconhecida. Ao “atrasarmos” a integral superficial para o tempo n , resulta

$$-(\Delta t)_n \int_{\Gamma^n} \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}_h^{n+1} : \nabla_{\Gamma} \zeta \, d\Gamma^n + \int_{\Gamma^n} \boldsymbol{\kappa}_h^{n+1} \cdot \zeta \, d\Gamma^n = \int_{\Gamma^n} \nabla_{\Gamma} \cdot \zeta \, d\Gamma^n \quad \forall \zeta \in Z_h, \quad (3.32)$$

em que tomamos $\mathbb{P} = \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\chi}^n$, equação (29), e utilizamos o Lema A.17. Notar que agora as funções estão *definidas e integradas* em Γ^n .

Comparando (3.32) com a versão de Galerkin de (3.28) observamos o seguinte termo estabilizador no primeiro membro de (3.32)

$$- \int_{\Gamma^n} \tau_{\kappa} \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}_h^{n+1} : \nabla_{\Gamma} \zeta \, d\Gamma^n, \quad (3.33)$$

para a escolha particular $\tau_{\kappa} = \Delta t_n$. Essa estabilização é uma proposta de Bänsch (2001), embora a interpretação do acoplamento acima seja nossa. Seu uso se tornou mandatório no esquema numérico final proposto no Capítulo 4, pois sua versão Galerkin (3.25) a $\tau_{\kappa} = 0$ se revelou incondicionalmente instável¹². Embora funcione, e até possa ser justificado heurísticamente pelo fato de gerar um acoplamento entre a forma fraca da identidade de Laplace-Beltrami e a equação de momento, essa estabilização proposta por Bänsch (2001) carece de uma análise numérica formal.

Segue agora o capítulo central da tese, cuja maioria do conteúdo já se encontra publicado em periódico (Rodrigues *et al.*, 2015).

¹²A instabilidade foi verificada a partir da presença de oscilações temporais da energia elástica e da máxima velocidade nodal.

Um método de elementos finitos para superfícies viscosas com rigidez de curvatura

4.1. Operador de Boussinesq-Scriven e força de Canham-Helfrich

Esse capítulo é sobre a simulação numérica de *superfícies viscosas com rigidez de flexão*. Mais do que uma simples concatenação dos dois capítulos anteriores, no presente capítulo a viscosidade superficial e a rigidez de curvatura se apresentam acopladas em um só problema. Do ponto de vista formal, isso se traduz em resolver o operador de Boussinesq-Scriven considerando-se a força de curvatura de Canham-Helfrich.

Adotamos uma versão *vetorial* para derivada de forma da energia elástica de Canham-Helfrich (Bonito *et al.*, 2010):

$$d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) = c_{\text{CH}} \int_{\Gamma} \left[(\mathbb{I} - 2\mathbb{P}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} (\nabla_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v}) \right] d\Gamma, \quad (4.1)$$

em que o vetor curvatura $\boldsymbol{\kappa}$ que nela aparece satisfaz a identidade de Laplace-Beltrami,

$$\int_{\Gamma} (-\Delta_{\Gamma} \chi \cdot \zeta) d\Gamma = \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \chi : \zeta d\Gamma \quad \forall \zeta \in Z. \quad (4.2)$$

Essas duas equações já foram apresentadas respectivamente em (3.9) e (3.25).

A forma bilinear associada ao operador de Boussinesq-Scriven é

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \doteq \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} : D_{\Gamma} \mathbf{v} \, d\Gamma = \int_{\Gamma} \{2\mu D_{\Gamma} \mathbf{u} : D_{\Gamma} \mathbf{v} + \lambda (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u})(\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v})\} \, d\Gamma, \quad (4.3)$$

ou, explicitamente,

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} \{\mu \mathbb{P} (\nabla_{\Gamma} \mathbf{u} + \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}^T) \mathbb{P} : \mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} \mathbb{P} + \lambda (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u})(\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v})\} \, d\Gamma, \quad (4.4)$$

em que utilizamos o Lema A.19 no termo do qual μ participa.

Notar que $\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ não se refere a uma superfície que escoa de modo incompressível, mas assim poderia ser ao tomarmos a equação (2.54) já desconsiderando a pressão termodinâmica p_s (pois a condição de incompressibilidade independe dela). Isso ilustra que embora o caso incompressível seja de interesse especial, não estamos restritos à ele.

A forma bilinear $\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ pode ser expressa de outras maneiras a partir de $\mathbb{P}$. Embora a versão mais simples possível não apresente grande vantagem, ao menos evita algumas poucas operações computacionais desnecessárias. À isso se refere o Lema 48.

Dada nossa motivação em estudar a dinâmica de bicamadas lipídicas tais como lipossomas, surge a questão de como incorporar possíveis restrições de área superficial e volume interior. Isso é discutido a seguir, inclusive sob o ponto de vista discreto.

4.1.1. Restrições de área superficial e volume interior

No que se segue, ressaltamos que a superfície Γ é função do tempo: $\Gamma = \Gamma(t)$.

Quanto à restrição da área $\mathcal{A}$, o que ocorre é a divergência superficial nula do campo de velocidade

$$\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.5)$$

pois

$$\frac{d\mathcal{A}}{dt} = \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} \, d\Gamma = 0. \quad (4.6)$$

Em tempo discreto, porém, a equação (4.6) não é satisfeita exatamente, podendo distanciar-se de seu valor correto $\mathcal{A}^*$. Um controle de área é então implementado como

$$\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} - \frac{\mathcal{A}^* - \mathcal{A}(t)}{\tau_{\mathcal{A}} \mathcal{A}(t)} = 0, \quad (4.7)$$

pois, integrando sobre Γ ,

$$\frac{d\mathcal{A}}{dt} = \frac{\mathcal{A}^* - \mathcal{A}}{\tau_{\mathcal{A}}}. \quad (4.8)$$

Ele impele à $\mathcal{A}(\Gamma(t))$ o valor $\mathcal{A}^*$, com tempo característico de aproximação $\tau_{\mathcal{A}}$. O multiplicador de Lagrange associado a conservação de área é a pressão superficial π_s . A restrição de

volume é discutida a seguir.

Lema 4.1.1. *Seja $\Omega = \Omega(t)$ a região encerrada por $\partial\Omega(t) \doteq \Gamma(t)$. O volume*

$$\mathcal{V}(t) \doteq \int_{\Omega(t)} d\Omega \quad (4.9)$$

satisfaz

$$\mathcal{V}(\Gamma(t)) = \frac{1}{3} \int_{\Gamma(t)} \chi \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\Gamma. \quad (4.10)$$

Além disso, sua variação temporal é dada por

$$\frac{d\mathcal{V}}{dt} = \int_{\Gamma(t)} \mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\Gamma, \quad (4.11)$$

em que $\mathbf{u}$ é a velocidade da superfície Γ .

Demonstração. Transcorrido um tempo infinitesimal δt , a nova posição dos pontos $\mathbf{x}$ que determinam Γ é $\varphi(\mathbf{x}) = \mathbf{x} + \delta t \mathbf{u}$. Ao tempo $t + \delta t$, o volume interior à membrana é dado por

$$\mathcal{V}(t + \delta t) = \int_{\Omega(t + \delta t)} 1 d\Omega = \int_{\Omega(t)} \mathcal{J} d\Omega, \quad (4.12)$$

em que $\mathcal{J}$ é o jacobiano da transformação de $\Omega(t + \delta t)$ para $\Omega(t)$, a saber,

$$\mathcal{J} = \det\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j}\right) = \det(\mathbb{I} + \delta t \nabla \mathbf{u}) = 1 + \delta t \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathcal{O}(\delta t^2). \quad (4.13)$$

Das igualdades acima, o resultado segue via Teorema da Divergência ao se calcular $d\mathcal{V}/dt$ via limite. ■

Lembremos que o equilíbrio osmótico determina o volume $\mathcal{V}^*$ delimitado por $\Gamma(t)$ tal que $d\mathcal{V}/dt = 0$. Todavia, assim como ocorre para a área superficial, o volume interior à $\Gamma(t)$ pode desviar-se do valor $\mathcal{V}^*$ pré-fixado por ocasião da evolução em tempo discreto. Para contornar esse problema, implementamos o seguinte controlador de volume

$$\int_{\Gamma(t)} \mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\Gamma = - \frac{\mathcal{V}(\Gamma(t)) - \mathcal{V}^*}{\tau_{\mathcal{V}}}, \quad (4.14)$$

o qual impele à $\mathcal{V}(\Gamma(t))$ o valor $\mathcal{V}^*$ com tempo característico de aproximação $\tau_{\mathcal{V}}$.

À equação (4.14) sujeita-se a dinâmica da membrana. Dela surge a *pressão interna* p (uniforme), a qual se manifesta em Γ como uma força superficial

$$\mathbf{f}_p = p \tilde{\mathbf{n}}, \quad (4.15)$$

e que de fato é o multiplicador de Lagrange associado à restrição de volume.

Observação 4.1.2. *Os controles de área e volume não tem efeito algum no problema contínuo se o volume inicial é igual a $\mathcal{V}^*$ e a área inicial é igual a $\mathcal{A}^*$. De fato, se $\mathcal{V}(t=0) = \mathcal{V}^*$ então (4.14) impõe à $\mathcal{V}(t)$ o valor $\mathcal{V}^*$ à todo instante. Similarmente, se $\mathcal{A}(t=0) = \mathcal{A}^*$, então (4.7) implica que $\mathcal{A}(t) = \mathcal{A}^*$ para todo $t > 0$.*

4.1.2. Formulação variacional

A partir dos ingredientes anteriores, a formulação variacional que determina a velocidade da membrana é dada pelo problema *linear* a seguir.

Encontrar $(\mathbf{u}, \pi_s, \boldsymbol{\kappa}, p) \in V \times Q \times Z \times \mathbb{R}$ tal que

$$\left. \begin{aligned}
 & \int_{\Gamma} 2\mu D_{\Gamma} \mathbf{u} : D_{\Gamma} \mathbf{v} - \int_{\Gamma} \pi_s \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v} + \\
 & + c_{\text{CH}} \int_{\Gamma} \left[(\mathbb{I} - 2\mathbb{P}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa}) \right] = p \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{n}} + \int_{\Gamma} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \quad (4.16) \\
 & \int_{\Gamma} \xi \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} = \frac{\mathcal{A}^* - \mathcal{A}(\Gamma^n)}{\mathcal{A}(\Gamma^n) \tau_{\mathcal{A}}} \int_{\Gamma} \xi \quad (4.17) \\
 & \int_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\zeta} = \int_{\Gamma} \mathbb{P} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\zeta} \quad (4.18) \\
 & \int_{\Gamma} \mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{n}} = \frac{\mathcal{V}^* - \mathcal{V}(\Gamma^n)}{\tau_{\mathcal{V}}} \quad (4.19) \\
 & \forall (\mathbf{v}, \xi, \boldsymbol{\zeta}) \in V \times Q \times Z.
 \end{aligned} \right\} \text{(BSCH-FV)}$$

A pressão superficial π_s , o vetor curvatura $\boldsymbol{\kappa}$ e a pressão interna p surgem nesta formulação como subprodutos de determinar $\mathbf{u}$. A variável $\mathbf{f}$ no segundo membro de (4.16) representa possíveis forças externas à membrana (evidentemente, excetuando-se a pressão interior p). Para que (BSCH-FV) seja um problema bem posto, os espaços V , Q e Z precisam ser discutidos.

Como supomos que Γ é de classe C^2 , χ também é suave e assim uma integração por partes pode ser realizada no segundo membro de (4.18) de modo que $Z = L^2(\Gamma)^3$. Devido a suavidade de χ , há então uma única solução (suave) $\boldsymbol{\kappa} \in Z$.

Quanto à existência e unicidade de $\mathbf{u}$, por ora tomemos $\pi_s = p = 0$ por simplicidade e deixemos de lado as restrições (4.17) e (4.19) impostas por multiplicadores de Lagrange. Resta-

nos substituir $\boldsymbol{\kappa}$ em (4.16) e encontrar $\mathbf{u}$.

O problema (BSCH-FV) é bem posto se a forma bilinear

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} 2\mu D_{\Gamma}\mathbf{u} : D_{\Gamma}\mathbf{v} \quad (4.20)$$

for contínua e (fracamente) coerciva no espaço de velocidade V . Para continuidade, V deve estar contido em $H^1(\Gamma)^3$. Para coercividade, deve ser tomado seu quociente com o espaço de movimentos rígidos infinitesimais R , a saber

$$R \doteq \{\mathbf{w} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{w}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^3\} \quad (4.21)$$

porque se $\mathbf{w} \in R$, $D_{\Gamma}\mathbf{w}(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma$.

Assim, tomamos V como sendo *igual* a $H^1(\Gamma)^3/R$ para que $\mathcal{B}(\cdot, \cdot)$ seja coerciva em V . Considerando que $\boldsymbol{\kappa}$ é conhecido e ignorando as restrições geométricas) isto nos permite considerar $\mathbf{u}$ como unicamente definida por (4.16). O problema (BSCH-FV) é então assumido ser bem posto, produzindo uma única solução $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\kappa}) \in V \times Z$.

Observação: Para uso futuro, recordemos que a dissipação viscosa superficial é dada por

$$\mathcal{D} = \int_{\Gamma} 2\mu \|D_{\Gamma}\mathbf{u}\|^2 = \mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{u}). \quad (4.22)$$

Sobre a existência e unicidade de π_s e p como multiplicadores de Lagrange que impõem a equação de inextensibilidade (4.17) e a preservação de volume, a situação é similar àquela da equação de Stokes incompressível. Surge uma condição inf-sup, a saber

$$\inf_{0 \neq (\xi, r) \in Q \times \mathbb{R}} \sup_{0 \neq \mathbf{v} \in V} \frac{\int_{\Gamma} (\xi \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v} + r \boldsymbol{\kappa} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}})}{\|(\xi, r)\|_{Q \times \mathbb{R}} \|\mathbf{v}\|_V} > 0. \quad (4.23)$$

Esta condição é de fato satisfeita quando $Q = L^2(\Gamma)$, a menos que a superfície Γ tenha curvatura constante (uma esfera), caso este no qual as referidas restrições tornam-se linearmente *dependentes*¹ (Buscaglia, 2015). Consequentemente, o subespaço de campos inextensíveis e isocóricos é fechado em V (isto foi implicitamente considerado no parágrafo anterior) e a formulação mista (BSCH-FV) está bem posta.

Alertamos que o modelo viscosode bicamada lipídica aqui apresentado não incorpora fricção entre as camadas de moléculas lipídicas que a integram. Este modo de deformação pode ser dominante em algumas situações tais como aquelas discutidas por Evans & Yeung (1994) e Rahimi & Arroyo (2012). Não obstante, nossa contribuição se dá principalmente no tratamento numérico do operador de Boussinesq-Scriven acoplado ao modelo elástico de Canham-Helfrich.

¹Para uma superfície esférica, preservação de área superficial implica em preservação de volume interior.

4.1.3. Problema dinâmico

O problema (linear) *discreto* no espaço e no tempo consiste em *encontrar* $(\mathbf{u}_h^{n+1}, \pi_h^{n+1}, \boldsymbol{\kappa}_h^{n+1}, p^{n+1}) \in V_h \times Q_h \times Z_h \times \mathbb{R}$ tal que

$$\left. \begin{aligned}
 & \int_{\Gamma^n} 2\mu D_{\Gamma} \mathbf{u}_h^{n+1} : D_{\Gamma} \mathbf{v} - \int_{\Gamma^n} \pi_h^{n+1} \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v} - p^{n+1} \int_{\Gamma^n} \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{n}} + \\
 & + c_{\text{CH}} \int_{\Gamma^n} \left[(\mathbb{I} - 2\mathbb{P}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa}_h^{n+1} + \frac{1}{2} (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa}_h^{n+1}) \right] = \int_{\Gamma^n} \mathbf{f}^{n+1} \cdot \mathbf{v} \quad (4.24) \\
 & \int_{\Gamma^n} \xi \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u}_h^{n+1} + \int_{\Gamma^n} \gamma_h (\nabla_{\Gamma} \pi_h^{n+1} - \mathbf{g}_h^n) \cdot \nabla_{\Gamma} \xi = \frac{\mathcal{A}^* - \mathcal{A}(\Gamma^n)}{\mathcal{A}(\Gamma^n) \tau_{\mathcal{A}}} \int_{\Gamma^n} \xi \quad (4.25) \\
 & - (\Delta t)_n \int_{\Gamma^n} \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}_h^{n+1} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\zeta} + \int_{\Gamma^n} \boldsymbol{\kappa}_h^{n+1} \cdot \boldsymbol{\zeta} = \int_{\Gamma^n} \mathbb{P} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\zeta} \quad (4.26) \\
 & \int_{\Gamma^n} \mathbf{u}_h^{n+1} \cdot \tilde{\mathbf{n}} = \frac{\mathcal{V}^* - \mathcal{V}(\Gamma^n)}{\tau_{\mathcal{V}}} \quad (4.27) \\
 & \forall (\mathbf{v}, \boldsymbol{\zeta}, \xi) \in V_h^n \times Z_h^n \times Q_h^n,
 \end{aligned} \right\} \text{(BSCH-FVD)}$$

em que omitimos os multiplicadores de Lagrange das restrições de área e volume. Notar que todas as integrais são avaliadas na superfície discreta Γ^n (conhecida, portanto). Com a equação (2.100), a saber,

$$\mathbf{X}^{J,n+1} = \mathbf{X}^{J,n} + (\Delta t)_n \mathbf{u}_h^{n+1}, \quad (4.28)$$

(BSCH-FVD) está completamente definido.

À ele, algumas observações importantes:

- *Esquema numérico*: como verificamos, algoritmos nos quais velocidade e curvatura estão desacopladas são instáveis e portanto impraticáveis. Daí nossa opção por um esquema monolítico e, mais do que isso, pelo acoplamento velocidade-curvatura presente na equação (4.26). Isso foi detalhado ao final do Capítulo 3. “Implicitamos” (BSCH-FVD) tanto quanto possível, mas preservando a linearidade do problema a ser resolvido a cada passo de tempo. Assim também o fazem Rusu (2005), Dziuk (2008) e outros.
- *Estabilização da pressão SPGP*: conforme descrito no Capítulo 2. Seu emprego se deve à nossa escolha de utilizar a mesma ordem de interpolação para velocidade e pressão

superficial (triângulos lineares, sempre).

- *Eliminação de movimentos rígidos*: via multiplicadores de Lagrange, também conforme descrito no Capítulo 2, equações (2.106) e (2.107).
- *Parâmetros numéricos $\tau_{\mathcal{A}}$ e $\tau_{\mathcal{V}}$* : os tempos característicos dos controles de área de volume (não-físicos) são sempre tomados como

$$\tau_{\mathcal{A}} = \tau_{\mathcal{V}} = 10(\Delta t)_n, \quad (4.29)$$

pois esta escolha produz melhores resultados em termos de precisão e estabilidade, assim como apontaram extensivos experimentos.

- *Passo de tempo variável $(\Delta t)_n$* : imprescindível ao se considerar malhas adaptativas. O processo de remalhagem é descrito a seguir. Uma regra empírica para $(\Delta t)_n$ será fornecida só mais à frente, na seção de resultados.

4.1.4. Remalhagem

A simulação de superfícies dinâmicas requer técnicas de remalhagem ou refinamento adaptativo para preservar a precisão e permitir o cômputo de deformações relativamente grandes. A perda de precisão não está somente relacionada à degradação da qualidade da superfície triangulada, senão que também às mudanças locais de curvatura. Em razão disso, um esquema de remalhagem automática superficial foi empregado (Löhner, 1996).

O procedimento de remalhagem inicia-se definindo um único caminho discreto como superfície de suporte completo cuja fronteira é a maior aresta. A triangulação é então feita com um técnica de avanço de fronteira. O tamanho do elemento é definido utilizando-se a curvatura local pondo

$$h^*(\kappa) = \frac{c_h}{\kappa}, \quad (4.30)$$

em que κ é a curvatura escalar obtida ao se resolver (BSCH-FVD) e c_h é um parâmetro que permite escalar o tamanho de elemento. Já que somente a informação de curvatura local *escalar* é utilizada, o tamanho do elemento é isotrópico. Embora os nós da superfície obtida pela remalhagem pertençam à superfície discreta original, ambas não são coincidentes. Devido à isso ocorrem descontinuidades na energia elástica surgem após cada remalhagem (pela leve discrepância na curvatura), mas que são rapidamente dissipadas e que por isso não parecem ter impacto no resultado final das simulações.

A fim de avaliar a qualidade de uma dada superfície triangulada, dois parâmetros são definidos como medidas de qualidade de tamanho e forma de cada elemento triangular K :

- Qualidade de forma:

$$q_K^f \doteq (12\sqrt{3}) \frac{A_K}{P_K^2}, \quad (4.31)$$

em que A_K e P_K são respectivamente a área e o perímetro do triângulo;

- Qualidade de tamanho:

$$q_K^t \doteq \min \left\{ \frac{h^*(\kappa_K)}{h_K}, 1 \right\}. \quad (4.32)$$

Medidas globais de forma e tamanho são então definidas como

$$Q_f \doteq \min_K \{q_K^f\} \quad (4.33)$$

e

$$Q_t \doteq \min_K \{q_K^t\}. \quad (4.34)$$

A superfície dinâmica é então remalhada sempre que pelo menos uma das duas medidas de qualidade estiver aquém de valores limiares Q_f^* e Q_t^* . Para nossos resultados, $Q_f^* = 0.65$ e $Q_t^* = 0.55$.

4.1.5. Escalas de dimensionalização

Por conveniência, os resultados numéricos são expressos em forma adimensional. Para esse propósito, definimos o comprimento de referência de uma membrana inextensível como sendo

$$R_0 = \sqrt{\frac{\mathcal{A}}{4\pi}}, \quad (4.35)$$

de modo que a área adimensional seja sempre igual a 4π . Isto nos permite definir ainda escalas consistentes de velocidade, pressão superficial, curvatura, pressão interna e outras conforme a Tabela 4.1.

Um experimento de *relaxação* corresponde a resolver o problema (BSCH-FV) repetidamente a partir de uma configuração inicial Γ^0 , em que nenhuma força além da pressão interior é aplicada (*i.e.*, $\mathbf{f} = \mathbf{0}$), de maneira que a membrana evolui em direção a um equilíbrio estável mais próximo. Em um experimento de relaxação todas as variáveis adimensionais dependem apenas da configuração inicial adimensional $\hat{\Gamma}^0$, em que $\hat{\Gamma}^0$ é a versão adimensio-

Tabela 4.1: Escalas de adimensionalização para variáveis de intervenção. Os valores de referência correspondem a $R_0 = 10^{-6}$ m, $c_{CH} = 4 \times 10^{-20}$ J e $\mu = 10^{-8}$ Pa·s·m. Dado que há aproximadamente 5×10^6 moléculas de fosfatidilcolina ($C_{42}H_{82}NO_8P$) em uma área de $10^{-12}m^2$ (Alberts *et al.*, 2002) e que a massa molar do $C_{42}H_{82}NO_8P$ é $0,760 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, então $\rho = 6.3 \times 10^{-6} \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}$ e consequentemente o número de Reynolds característico é 2.5×10^{-9} .

Variável	Notação	Escala	Valor de referência
Espaço	$\mathbf{x}$	R_0	10^{-6} m
Tempo	t	$\frac{\mu R_0^2}{c_{CH}}$	0.25 s
Velocidade	$\mathbf{u}$	$\frac{c_{CH}}{\mu R_0}$	$4 \times 10^{-6} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$
Área	$\mathcal{A}$	R_0^2	10^{-12} m^2
Energia	$\mathcal{E}$	c_{CH}	4×10^{-20} J
Dissipação viscosa	$\mathcal{D}$	$\frac{c_{CH}^2}{\mu R_0^2}$	1.6×10^{-19} W
Pressão superficial	π_s	$\frac{c_{CH}}{R_0^2}$	$4 \times 10^{-8} \text{ Pa}\cdot\text{m}$
Curvatura	κ	$\frac{1}{R_0}$	10^6 m^{-1}
Pressão interior	p	$\frac{c_{CH}}{R_0^3}$	0.04 Pa
Força superficial	$\mathbf{f}$	$\frac{c_{CH}}{R_0^3}$	0.04 Pa
Força	F	$\frac{c_{CH}}{R_0}$	4×10^{-14} N

nal de Γ^0 , *i.e.*,

$$\mathbf{x} \in \Gamma^0 \iff \hat{\mathbf{x}} \doteq \frac{1}{R_0} \mathbf{x} \in \hat{\Gamma}^0. \quad (4.36)$$

Se duas dinâmicas de relaxação possuem o mesmo $\hat{\Gamma}^0$, então a história temporal (em termos do tempo adimensional) de todas quantidades adimensionais devem coincidir, não importa quais forem os valores de R_0 , c_{CH} e μ .

Salvo menção contrária, *todas as quantidades são adimensionais no que se segue*. À elas presta-se a Tabela 4.1.

4.2. Resultados numéricos

4.2.1. Experimentos de relaxação

Formas de equilíbrio de membranas lipídicas fechadas, ou equivalentemente, pontos estacionários (mínimos locais) da energia de Canham-Helfrich são as configurações nas quais a membrana está em equilíbrio estático – a solução do problema (BSCH-FV) é $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma$. Essas configurações de equilíbrio estático tem sido extensivamente estudadas por Seifert (1997), entre outros.

A *relaxação viscosa* de uma membrana corresponde a evolução, sem qualquer força externa ($\mathbf{f} \equiv \mathbf{0}$), de uma forma inicial Γ^0 em direção a uma forma de equilíbrio Γ^∞ , obedecendo o modelo viscoso aqui descrito. No que se segue, avaliamos o desempenho do método proposto dado por (BSCH-FV) e (4.28) em experimentos de relaxação. Primeiro determinamos o limite de estabilidade temporal do método, ou seja, o máximo Δt para comportamento estável em função do tamanho de malha. Como não há solução analítica para o transiente de relaxação, analisamos a consistência dos resultados obtidos com diferentes malhas. A forma discreta de equilíbrio, por outro lado, pôde ser comparada com as soluções quasi-analíticas apresentadas em 3.1.1 na Sub-sub-seção *Equilíbrios estáticos de formas tridimensionais axis-simétricas*. Resultados em outras topologias também são reportados.

Limite de estabilidade temporal

A forma inicial pode ser vista na Figura 4.1, com uma triangulação que corresponde à mais fina malha empregada (MR3). O volume interior é $\mathcal{V}(t=0) = 3.1907$, e o mesmo valor é posto em $\mathcal{V}^*$. Como comentamos, embora esse valor já seja adimensional, a quantidade adimensional relevante é o *volume reduzido* (Seifert, 1997), ora definido em (3.16) como

$$\nu = \frac{6\sqrt{\pi}\mathcal{V}}{\mathcal{A}^{3/2}}, \quad (4.37)$$

em que $\mathcal{A}$ e $\mathcal{V}$ são quantidades dimensionais. Por simplicidade, suprimimos o rótulo 3D, que agora não mais se faz necessário. Para a malha MR3, $\nu(t=0) = 0.7617$.

Todos os resultados a seguir foram computados com o algoritmo definido por (BSCH-FVD) e (4.28), com $\tau_{\mathcal{A}} = \tau_{\mathcal{V}} = 10 \Delta t$ e parâmetro de estabilização PGP dado por

$$\gamma_h \doteq \frac{d_K^2}{10\mu}, \quad (4.38)$$

assim como já definido em (2.104).

Os primeiros experimentos almejam determinar o máximo passo de tempo Δt_{lim} para o qual o esquema discreto (BSCH-FVD) se comporta de maneira estável. Para isso foram rodados 100 passos de tempo em cada malha para várias escolhas de Δt . Resultados de instabilidade foram facilmente reconhecidos por severas flutuações tanto da energia elástica como da máxima velocidade nodal. O valor limite Δt_{lim} foi obtido por busca dicotômica com tolerância menor do que 20%.

Três malhas altamente refinadas foram empregadas, das quais a mais fina é a já descrita malha MR3. O máximo passo de tempo permitido pelo método pode ser observado na Tabela 4.2, para o qual a lei de ajuste adimensional observada é

$$\Delta t_{\text{lim}} \approx 0.42 h_{\min}^2, \quad (4.39)$$

ou, em termo dimensionais,

$$\Delta t_{\text{lim}} \approx \frac{0.42\mu}{c_{\text{CH}}} h_{\min}^2 \quad (\text{dimensionalmente}). \quad (4.40)$$

Evidentemente, a constante 0.42 poderia depender da forma da membrana. Por isso membranas de formatos bem diferentes foram testadas como descrito anteriormente, inclusive com triangulações uniformes ou adaptativas (na qual o tamanho do elemento depende do valor local da curvatura média escalar). O máximo valor de Δt_{lim} obtido para cada malha inicial como função de $h_{\min}$ é exibido na Figura 4.1. O melhor ajuste em cor magenta corresponde a (4.39), que, assim como se vê, sobre-estima o valor de Δt_{lim} em alguns casos. Ademais, observamos em muitos casos que escolher Δt muito próximo do limite de estabilidade pode ser prejudicial à precisão de cômputo. Isso pode ser uma consequência do termo estabilizador em (4.26), já que nele estamos pondo $\tau_K = (\Delta t)_n = \Delta t$. Por isso, a constante 0.42 em (4.39) foi reduzida a um quarto de seu valor, e então

$$\Delta t \leftarrow 0.105 h_{\min}^2. \quad (4.41)$$

para cada iteração temporal. Como Δt está em função $h_{\min}$, a estratégia (4.41) é de grande utilidade ao se fazer remalhagem. Todos os experimentos de relaxação descritos a seguir foram conduzidos com essa estratégia de determinação de passo de tempo.

Figura 4.1: Limite de estabilidade Δt_{lim} como função do tamanho mínimo h_{min} de elemento. Os valores representados como triângulos são aqueles experimentalmente obtidos para diferentes malhas de diferentes geometrias e refinamentos (algumas das quais identificadas com os dados da figura). A curva magenta representa o melhor ajuste de mínimos quadrados $0.42 h_{\text{min}}^2$. Em ciano, a estratégia de passo de tempo adotada, $0.105 h_{\text{min}}^2$.

Malha	# Nós	# Elementos	h_{min}	Δt_{lim}
MR1	592	1180	0.041	7.0×10^{-4}
MR2	2177	4350	0.021	1.6×10^{-4}
MR3	8126	16248	0.010	4.2×10^{-5}

Tabela 4.2: Máximo passo de tempo para comportamento estável do esquema proposto para cada uma das malhas e em dinâmica de relaxação.

Convergência

Apresentamos agora resultados de convergência do método proposto. As malhas são MR1, MR2 e MR3, com respectivos passos de tempo dados por (4.41): 1.75×10^{-4} , 0.40×10^{-4} e 1.05×10^{-5} . O tempo adimensional simulado é 0.06. Não há solução analítica para o problema transiente, de modo que buscou-se evidências de resultados consistentes em convergências de malha e de passo de tempo.

Na Figura 4.2 exibimos curvas de várias quantidades ao longo do processo de relaxação (todas adimensionais): energia $\mathcal{E}$, pressão interior p , a dissipação viscosa $\mathcal{D}$, e as normas $L^2(\Gamma)$ do campo de velocidade $\mathbf{u}$ e da pressão superficial π_s , todas como função do tempo adimensional t . Acima da curva de energia, exibimos cortes em seção transversal aos correspondentes tempos de simulação.

O processo de relaxação é atingido em $t = 0.06$, com uma redução de energia de aproximadamente 20% (de ≈ 49 para ≈ 39). As curvas correspondentes a MR1, MR2 e MR3 são consistentes e estão em bom acordo para as duas malhas mais finas, fornecendo evidências de convergência de malha. Notar que para malha a MR1 ocorrem transientes espúrios em $t \approx 0.03$ a 0.04 (especialmente evidente na curva de $\|\mathbf{u}\|_2$), os quais desaparecem completamente nas malhas mais refinadas MR2 e MR3.

Formas estáticas de equilíbrio e dinâmica de relaxação

Formas estáticas de equilíbrio podem ser obtidas via escoamento gradiente segundo o que expusémos no Capítulo 3. Nada impede, porém, que tais formas sejam obtidas por meio de uma dinâmica viscosa tal como aquela de (BSCH-FVD). Ao fazê-lo, nosso objetivo é apenas verificar se o método proposto fornece superfícies discretas estacionárias que aproximam suas respectivas formas de equilíbrio exatas. Nossa soluções de referência são as soluções quasi-analíticas descritas em 4.2.1 na Sub-sub-seção *Equilíbrios estáticos de formas tridimensionais axissimétricas* – duas formas de equilíbrios oblatas de volumes reduzidos $\nu \approx 0.61$ e $\nu \approx 0.81$. Para cada uma delas, 3 malhas com distintos tamanhos de elementos foram utilizadas (essencialmente as mesmas da sub-sub-seção anterior).

Para comparar os resultados tridimensionais com a solução axissimétrica, o eixo de simetria da membrana foi determinado diagonalizando-se o tensor

$$\int_{\Gamma} \mathbf{x} \otimes \mathbf{x} d\Gamma, \quad (4.42)$$

de modo que cada ponto de Γ foi descrito por coordenadas cilíndricas (r, ϕ, z) e também uma coordenada de comprimento s ao longo dos meridianos.

Na Figura 4.3(a) as coordenadas r e z dos nós da malha relaxada mais grossa foram superpostas às correspondentes curvas quasi-analíticas (apenas 20% do nós são exibidos para deixar a curva visível). Somente os resultados para a forma de equilíbrio correspondente ao

Figura 4.2: Evolução temporal da energia, pressão interna, dissipação, e normas de velocidade e pressão superficial (em $L^2(\Gamma)$) ao longo do processo de relaxação. As diferentes cores correspondem a malhas cada vez mais finas, MR1, MR2 e MR3. Acima, cortes da membrana em seção transversal para vários instantes (a posição horizontal de cada forma corresponde aproximadamente a seu tempo correspondente).

volume reduzido $\nu \approx 0.61$ são exibidos, já que aqueles em que $\nu \approx 0.81$ são análogos. A configuração de equilíbrio é corretamente reproduzida. Para comparar a curvatura escalar, nós a plotamos como função do comprimento de arco s na Figura 4.3(b). Cada ponto contido nas figuras envolve um erro, quantificado por

$$\text{err}(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{1}{\#\text{nós}} \sum_{j=1}^{\#\text{nós}} \|\mathbf{X}^j - \text{cp}(\mathbf{X}^j)\|_2^2}, \quad (4.43)$$

em que $\text{cp}(\mathbf{x})$ é a projeção ortogonal de $\mathbf{x}$ sobre a forma “exata” de Γ . De mesmo modo, comparando os valores numéricos nodais das diferentes quantidades com respeito a sua projeção ortogonal, computamos estimativas para erros de diferentes campos: $\text{err}(\tilde{\mathbf{n}})$, $\text{err}(\boldsymbol{\kappa})$, $\text{err}(\kappa)$, $\text{err}(\pi_s)$.

Figura 4.3: Formas de equilíbrio numérica e quasi-analítica para $\nu \approx 0.61$. (a) Coordenadas r e z de posições nodais (círculos vermelhos) e forma exata (curva). (b) Idem anterior, para curvatura média escalar. (c) Erro nodal do vetor curvatura $\boldsymbol{\kappa}_h$ como função do comprimento de arco s para as três malhas: MR1 (vermelho), MR2 (verde) e MR3 (azul). (d) Idem anterior (c) para o vetor normal $\tilde{\mathbf{n}}_h$.

Os resultados estão sumarizados na Tabela 4.3, para os dois volumes reduzidos $\nu \approx 0.61$ e $\nu \approx 0.81$. Observamos ordem de convergência $\mathcal{O}(h^{5/3})$ para a posição e $\mathcal{O}(h^{3/2})$ para o vetor curvatura $\boldsymbol{\kappa}$, as principais incógnitas do problema. A pressão superficial π_s parece convergir com primeira ordem, enquanto a pressão interior p e a energia elástica $\mathcal{E}$ parecem ser aproximadas em segunda ordem.

É interessante que a normal computada pelo esquema proposto, $\tilde{\mathbf{n}}_h$, numericamente obtida como $\boldsymbol{\kappa}_h/\kappa_h$, converge com ordem menor do que o próprio $\boldsymbol{\kappa}_h$. Na Figura 4.3(c)-(d) exibimos a distribuição do erro de $\boldsymbol{\kappa}_h$ e de $\tilde{\mathbf{n}}_h$ como função do comprimento de arco s . O erro em $\tilde{\mathbf{n}}_h$ concentra-se em regiões nas quais a curvatura média toma valores próximos de zero.

Volume reduzido $v \approx 0.61$ ($p = -15.61$, $\mathcal{E} = 48.47$)

malha	$h_{\min}$	err($\mathbf{x}$)	err($\tilde{\mathbf{n}}$)	err($\boldsymbol{\kappa}$)	err(κ)	err(π_s)	err(p)	err($\mathcal{E}$)
MR1	0.04	2.91E-03	1.21E-01	1.04E-01	7.34E-02	6.26E-01	5.1581E-01	5.7932E-01
MR2	0.02	8.45E-04	3.43E-02	3.25E-02	1.99E-02	2.34E-01	1.4022E-01	1.5458E-01
MR3	0.01	2.68E-04	2.59E-02	1.23E-02	5.38E-03	1.55E-01	3.7460E-02	3.8833E-02
OCE		1.67	1.08	1.50	1.83	0.98	1.84	1.90

Volume reduzido $v \approx 0.81$ ($p = -14.39$, $\mathcal{E} = 35.90$)

malha	$h_{\min}$	err($\mathbf{x}$)	err($\tilde{\mathbf{n}}$)	err($\boldsymbol{\kappa}$)	err(κ)	err(π_s)	err(p)	err($\mathcal{E}$)
MR1	0.04	2.61E-03	1.48E-01	5.41E-02	3.90E-02	5.74E-01	3.92E-01	1.49E-01
MR2	0.02	7.54E-04	4.43E-02	1.62E-02	1.05E-02	1.74E-01	1.08E-01	3.52E-02
MR3	0.01	2.55E-04	2.52E-02	6.02E-03	2.80E-03	8.12E-02	2.91E-02	5.36E-03
OCE		1.63	1.24	1.54	1.85	1.37	1.83	2.34

Tabela 4.3: Análise de convergência de diferentes variáveis em comparação a solução quasi-analítica para $v \approx 0.61$ e $v \approx 0.81$. O acrônimo OCE denota ordem de convergência estimada.

Distorções de malha em equilíbrio estático

O processo de remalhagem é importante também na estabilidade do método em longo prazo. Nas simulações de relaxação membranal, uma vez minimizada a energia de forma ainda persiste um pequeno campo de velocidade indiscutivelmente semelhante às velocidades “parasitas” que aparecem em escoamentos capilares (Ganesan *et al.*, 2007; Gross & Reusken, 2007; Reusken, 2008; Popinet, 2009; Ausas *et al.*, 2010) vagarosamente distorcem a malha até que a simulação diverge.

Uma tentativa de ilustrar o fenômeno de velocidades “parasitas” é exibida na Figura 4.4. A evolução da energia $\mathcal{E}$ e da qualidade de malha Q_f são exibidas ao longo da dinâmica. A relaxação deveria terminar em $t \approx 0.06$, com velocidade tendendo à zero e a membrana permanecendo para sempre na configuração de equilíbrio. Contudo, observamos que a qualidade de malha se deteriora estacionariamente e a energia de Canham-Helfrich começa a crescer após $t \approx 0.07$. Esse comportamento, se deixado progredir, polui completamente a simulação. As curvas tracejadas correspondem à evolução de $\mathcal{E}$ e de Q_f que seriam obtidas sem o processo de remalhagem. As distorções de malha dessas instabilidades são mais pronunciadas em uma determinada região específica. As inserções na Figura 4.4 exibem a região afetada exatamente quando no passo de tempo de remalhagem e algum tempo depois, em uma simulação sem remalhamento.

Após a remalhagem em $t = 0.1$, há um ligeiro ajuste da energia devido à alteração de malha e então novamente um estado pseudo-estacionário se desenvolve, no qual nada acontece a não ser uma vagarosa distorção das posições nodais. Após o tempo $t \approx 0.3$, este movimento espúrio começa a afetar significativamente a qualidade de malha e a energia começa a crescer novamente. Uma nova instabilidade se desenvolve de modo bastante similar à primeira, levando à uma segunda remalhagem em $t \approx 0.36$. As inserções mostram a região crítica e exibem o padrão de distorção.

A estratégia de remalhagem é então utilizada não só como uma estratégia de adaptação da malha, senão que também como um mecanismo de controle para modos de distorção espúrios em equilíbrio estático.

Figura 4.4: Dinâmica de relaxação em longo prazo. Gráficos de $\mathcal{E}$ e Q_f em função do tempo. O estado estacionário não é completamente alcançado e velocidades “parasitas” distorcem a malha e ativam o processo de remalhagem. As linhas tracejadas mostram a evolução sem remalhagem. As malhas indicadas revelam o padrão instável das distorções.

Relaxação de superfícies de gênero não-nulo

Até o presente, discutimos apenas superfícies viscosas de gênero nulo, mas à elas não se limita o método aqui proposto. Do ponto de vista do problema contínuo é irrelevante o fato de a superfície ter gênero não-nulo, como consequência do Teorema de Gauss-Bonnet² e de (3.3). Não é óbvio, porém, que o método aqui proposto é suficientemente robusto em qualquer topologia – principalmente no que diz respeito ao processo de remalhagem.

Como exemplo em outras topologias, abordaremos relaxações viscosas de superfícies de gênero um. Para isso, tratamos de “inventar” algumas delas. A primeira é um toro cujo raio do tubo pode ser variável e cujas equações paramétricas que o definem são

$$(STV) \begin{cases} x(\theta, \phi) = (R + r \cos \phi) \frac{\cos \theta}{1.0 + k \cos(\min\{\theta, 2\pi - \theta\})}, & (4.44) \\ y(\theta, \phi) = (R + r \cos \phi) \frac{\sin \theta}{1.0 + k \cos(\min\{\theta, 2\pi - \theta\})}, & (4.45) \\ z(\theta, \phi) = r \sin \phi \frac{1}{1.0 + k \cos(\min\{\theta, 2\pi - \theta\})}, & (4.46) \end{cases}$$

em que $|k| < 1$. A escolha $k \equiv 0$ resulta nas equações paramétricas de um toro usual, *i.e.*, obtido pela revolução de uma superfície circular plana de raio r com raio de revolução R . Por outro lado, se $|k| \neq 0$ então o resultado é um toro de tubo variável cujo raio é dado por

$$z\left(\theta, \phi = \frac{\pi}{2}\right) = r \frac{1}{1.0 + k \cos(\min\{\theta, 2\pi - \theta\})}, \quad (4.47)$$

e que portanto varia suavemente no intervalo $[r/(1 + |k|); r/(1 - |k|)]$.

A segunda superfície-exemplo também é uma modificação de um toro, a saber:

$$(STM) \begin{cases} x(\theta, \phi) = (R + r \cos \phi) \cos \theta, & (4.48) \\ y(\theta, \phi) = (R + r \cos \phi) \sin \theta, & (4.49) \\ z(\theta, \phi) = r \sin \phi \frac{1}{1.0 + c [\sin(m\theta)]^2}, & (4.50) \end{cases}$$

em que $|c| < 1$ e $m \in \mathbb{Z}$. Como veremos, as equações paramétricas (STM) geram superfícies de gênero um *com ondulações*.

Especificamente, foram escolhidas duas geometrias: (STV) com $k = 0.5$ para e (STM)

²O Teorema de Gauss-Bonnet e o conceito de gênero de uma superfície são apresentados no Apêndice C.

com $c = 1$ e $m = 2$, ambas a valores $R = \sqrt{2}$ e $r = 1$. Elas, após trianguladas, tiveram cada uma das suas coordenadas nodais modificadas de acordo com a seguinte atribuição de variáveis: $(x \leftarrow 0.8x, y \leftarrow 1.0y, z \leftarrow 1.5z)$. Os valores-alvo de área $\mathcal{A}^*$ e de volume $\mathcal{V}^*$ foram impostos exatamente iguais aos das respectivas geometrias iniciais discretas. As simulações são para parâmetros materiais $\mu = 1$ e $c_{\text{CH}} = 1$.

Como resultado, a curva de energia da dinâmica de (STV) é exibida na Figura 4.5, e na Figura 4.6 para (STM). Para ambas, as formas inicial e final são postas acima de seus respectivos tempos. Assim como nos casos de relaxação anteriormente reportados, surgem picos de energia devido ao processo de remalhagem³. Tais picos de energia se dissipam rapidamente e não impactam no resultado final das simulações. A despeito disso, e também como teste de robustez para o próprio processo de remalhagem, não foram reveladas dificuldades adicionais nessa nova topologia.

Aproveitando o ensejo, vamos agora reportar a relaxação a um ao toro *especial*: o toro de Clifford. Trata-se da superfície toroidal gerada a parâmetros $R = \sqrt{2}$ e $r = 1$, ou com $k \equiv 0$ em (STV) ou com $c \equiv 0$ em (STM). A conotação toro *especial* refere-se ao fato de tal superfície ser a única a satisfazer, com a relação de igualdade, a *Conjectura de Willmore (1965): Toda superfície compacta $\Gamma \subset \mathbb{R}^3$ com $g = 1$ deve satisfazer*

$$\mathcal{W}(\Gamma) \geq 8\pi^2, \quad (4.51)$$

em que $\mathcal{W}(\Gamma)$ é a energia de Willmore. Em 2013, a *Conjectura de Willmore* foi estabelecida como verdadeira pelo brasileiro Fernando Codá e o português André Neves. De fato, os autores demonstraram um resultado ainda mais geral: *qualquer superfície compacta de gênero positivo satisfaz a relação (4.51)*.

De acordo com as nossas definições de curvatura média e energia de Canham-Helfrich

$$\mathcal{E}(\Gamma) = \frac{c_{\text{CH}}}{2} \mathcal{W}(\Gamma), \quad (4.52)$$

e, assim, (4.51) traduz-se em

$$\mathcal{E}(\Gamma) \geq 4\pi^2 c_{\text{CH}}. \quad (4.53)$$

Em outras palavras, a conjectura estabelece que o toro de Clifford é a superfície compacta de gênero um para qual a energia de Willmore é a menor possível. Como ora dissemos, em se tratando de superfícies com $g = 0$, a energia mínima é atingida em geometria esférica (para uma esfera de raio arbitrário). Para $g > 1$, no entanto, essa ainda é uma questão em aberto. É fato que dentre *todas* as superfícies compactas de gênero positivo, a igualdade em (4.51) só é atingida pelo toro de Clifford (Marques & Neves, 2014a); o ponto é que em função de um certo $g > 1$, o ínfimo da energia de Willmore é desconhecido.

³Lembremos que a remalhagem é necessária para evitar a deterioração da malha devido às velocidades “parasitas”.

Para relaxação a um toro de Clifford, tratamos justamente de perturbar a geometria que o define. Para evitar efeitos dinâmicos secundários de mudança de área e volume, o volume original foi preservado em uma tolerância relativa da ordem de 10^{-6} (a área foi exatamente a mesma, pois esta pode ser facilmente controlada após a remalhagem por um processo iterativo de escala). Após triangulado, o toro de Clifford teve cada uma das suas coordenadas nodais modificadas de acordo com a seguinte atribuição de variáveis ($x \leftarrow 0.9x$, $y \leftarrow 1.066y$, $z \leftarrow 1.0z$) que, por exemplo, resultou no mesmo volume do toro de Clifford discreto. Ao longo da simulação, os valores-alvo de área $\mathcal{A}^*$ e de volume $\mathcal{V}^*$ foram impostos exatamente iguais ao da respectiva geometria inicial (toro de Clifford discreto perturbado)⁴. Novamente, a simulação reportada refere-se a uma membrana cuja rigidez à flexão e viscosidade são $c_{\text{CH}} = 1$ e $\mu = 1$.

A curva de energia resultante da dinâmica de relaxação é exibida na Figura 4.7. O valor exato da mínima energia é $\mathcal{E}_{\text{min}} = 4\pi^2 \approx 39.48$. Da curva exibida, um valor representativo de $\mathcal{E}_h$ certamente figura entre 39.6 e 40.0, o que resulta em um erro relativo menor do que 2.0%. Como anteriormente, também há oscilações na energia por conta do processo de remalhagem. No entanto, esses picos sempre se devem à não suavidade da geometria discreta remalhada, e não porque a membrana teve alguma mudança geométrica de fato. As formas inicial e final são exibidas acima de cada um de seus respectivos tempos em que, para comparação, a metade inferior corresponde ao toro de Clifford exato. Embora em nível “qualitativo”, as seções transversais correspondentes revelam que a forma final atingida é realmente o toro de Clifford. Assim mesmo tem que ser, pois, levando-se em conta o fato de que a geometria inicial é uma pequena perturbação da última, o estado de equilíbrio estável mais próximo ainda é o tal toro. Embora haja sua unicidade como mínimo global, a questão é que para grandes perturbações não se exclui a possibilidade de existirem outros mínimos (locais) estáveis. O estado estacionário atingido pode então depender intrinsecamente da própria dinâmica viscosa (como em breve discutiremos, inclusive).

⁴Quanto à forma exata, a área e do volume de um toro podem ser calculados respectivamente pelo primeiro e segundo teorema de Pappus de Alexandria, de modo que $\mathcal{A}_{\text{toro}} = 2\pi r \times 2\pi R = 4\pi^2 r R$ e $\mathcal{V}_{\text{toro}} = \pi r^2 \times 2\pi R = 2\pi^2 r^2 R$.

Figura 4.5: Evolução temporal da energia $\mathcal{E}$ (dimensional) para a dinâmica de relaxação de um toro perturbado a partir da superfície parametrizada (STV). As formas inicial e final são exibidas acima para os tempos correspondentes. Os picos de energia são decorrentes do processo de remalhagem, mas se dissipam rapidamente.

Figura 4.6: Evolução temporal da energia $\mathcal{E}$ (dimensional) para a dinâmica de relaxação de um toro perturbado a partir da superfície parametrizada (STM). As formas inicial e final são exibidas acima para os tempos correspondentes. Os picos de energia são decorrentes do processo de remalhagem, mas se dissipam rapidamente.

Figura 4.7: Evolução temporal da energia $\mathcal{E}_h$ (dimensional) em direção à relaxação ao toro de Clifford. Acima, as formas inicial e final e respectivas seções transversais, pelas quais podemos atestar que a forma final é realmente um toro de Clifford.

Osmose

Como já há muito comentado, a restrição de volume membranal interior fixo toma parte para que pressões osmóticas não surjam espontaneamente. Contudo, se o ambiente tem alterada sua concentração de íons e açúcares, a semi-permeabilidade das membranas lipídicas dá então lugar a osmose. Nem sempre um volume de equilíbrio interior à membrana é passível de ser atingido, pelo que às vezes ocorre a *lise* celular (*e.g.*, hemácias quando em solução ambiente suficientemente hipotônica). A despeito disso, dentro de uma certa variação de concentração do meio exterior, uma acomodação do volume interior pode dar conta de re-estabelecer o equilíbrio e anular a pressão osmótica gerada pela alteração de concentração. Esses casos é que motivam a apresentação dessa sub-sub-seção. Não temos a pretensão, no entanto, de modelar fenômenos osmóticos em grandes detalhes biofísicos (tais como o enrugamento de hemácias em soluções hipertônicas, por exemplo). O fato é que o próprio mecanismo de como osmose se dá intriga discussões até os dias de hoje⁵.

Para membranas de área constante, a equação que modela alteração osmótica de volume $\mathcal{V} = \mathcal{V}(t)$ é (Weiss, 1996)

$$\frac{d\mathcal{V}}{dt} = \alpha_{\mathcal{V}} \left(\frac{\mathcal{V}_{\text{eq}} - \mathcal{V}}{\mathcal{V}\mathcal{V}_{\text{eq}}} \right), \quad (4.54)$$

em que $\mathcal{V}_{\text{eq}}$ é o volume de equilíbrio para o qual a pressão osmótica se anula e $\alpha_{\mathcal{V}}$ é um parâmetro cuja dimensão de unidades torna (4.54) consistente (e que em princípio pode depender do próprio $\mathcal{V}$). Entre outros, $\alpha_{\mathcal{V}}$ depende da condutividade hidráulica membranal. Por simplicidade, daqui por diante tomaremos $\alpha_{\mathcal{V}} = \alpha$ (constante).

A equação diferencial (4.54) é não-linear e não possui solução analítica explícita. Para pequenas mudanças de volume, no entanto, $\mathcal{V}(t) \approx \mathcal{V}_{\text{eq}}$ e (4.54) pode ser linearizada em

$$\frac{d\mathcal{V}}{dt} = \alpha \left(\frac{\mathcal{V}_{\text{eq}} - \mathcal{V}}{\mathcal{V}_{\text{eq}}^2} \right), \quad (4.55)$$

que agora sim possui solução explícita

$$\mathcal{V}(t) = \mathcal{V}_{\text{eq}} + (\mathcal{V}_0 - \mathcal{V}_{\text{eq}}) \exp\left(-\frac{\alpha}{\mathcal{V}_{\text{eq}}^2} t\right), \quad (4.56)$$

se a condição inicial é $\mathcal{V}(t=0) = \mathcal{V}_0$. Assim sendo, $\mathcal{V}$ evolui em direção a $\mathcal{V}_{\text{eq}}$ com tempo característico

$$\tau_{\text{osm}} \doteq \frac{\mathcal{V}_{\text{eq}}^2}{\alpha}. \quad (4.57)$$

Evidentemente, uma vez atingido uma certa forma de equilíbrio, $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{\text{eq}}$ seja qual for o tempo característico τ_{osm} . Do ponto de vista dinâmico, porém, há também o próprio tempo

⁵O *mecanismo* de como a osmose se dá ainda não é muito bem entendido, mas isso não impede uma explicação muito bem detalhada e interessante de como, por exemplo, os processos osmóticos podem realizar trabalho útil – assim discute Nelson (2014).

de relaxação membranal τ_{rlx} (tempo adimensional apresentado na Tabela 4.1). Sobretudo nesse caso, os efeitos dinâmicos ditam fundamentalmente qual será a geometria membranal de equilíbrio. As simulações reportadas a seguir, portanto, visam descrever como é essa dependência. Para tanto, utilizamos τ_{osm} muito maior do que tempo característico utilizado nos controles de área e volume $\tau_{\mathcal{A}}$ e $\tau_{\mathcal{V}}$, com área-alvo $\mathcal{A}^* = \mathcal{A}_0 = 4\pi$ e volume-alvo $\mathcal{V}^*$ dado por (4.56).

A geometria inicial elegida é uma forma de equilíbrio oblata de área superficial 4π e volume reduzido $v = 0.8$ (as quais definem unicamente o valor de $\mathcal{V}_0$). Já o volume de equilíbrio $\mathcal{V}_{\text{eq}}$ foi escolhido de modo que $v_{\text{eq}} = 0.5$. Assim, $\mathcal{V}(t)$ foi posto segundo (4.56), que é exatamente a evolução ditada pela osmose em aproximação linear. Quatro valores de τ_{osm} foram estudados: 10^{-2} , 10^{-1} , 10^{+0} e 10^{+1} , mais uma vez a parâmetros materiais $\mu = 1$ e $c_{\text{CH}} = 1$. Trata-se, portanto, de caso em que temos as variáveis adimensionalizadas (assim como descrito em detalhes na Sub-seção 4.1.5).

Como se pode ver na Figura 4.8, para $\tau_{\text{osm}} \ll \tau_{\text{rlx}}$, isto é, se a mudança de volume é muito rápida em comparação com o tempo característico de relaxação τ_{rlx} , não há tempo hábil para a dinâmica de relaxação tomar parte. Por outro lado, se τ_{osm} é da ordem, ou maior do que τ_{rlx} , então a dinâmica de relaxação é preponderante; a evolução osmótica se dá quase-estaticamente e aí sim há tempo hábil para que a relaxação revele seu efeito (nesse último caso alterando a forma de equilíbrio membranal final). Há de se salientar que o método implementado não possui um algoritmo para detecção de auto-interseção membranal. De fato, isso ocorreu nas evoluções a tempos característicos τ_{osm} iguais a 10^{-1} , 10^{+0} e 10^{+1} , o que, por outro lado não invalida nossa discussão sobre a evolução quasi-estática devido a dinâmica de relaxação (pois por meio dela é que ocorrem as auto-interseções). Na Figura 4.9 exibimos a curva de energia para cada evolução, cujo aumento se deve à redução do volume reduzido. As quedas ao tempo final para as curvas de energia de τ_{osm} a valores 10^{-1} , 10^{+0} e 10^{+1} se devem ao fato de que antes de chegar a tais estados a membrana passou por “geometrias proibidas” de auto-interseção.

Figura 4.8: Evolução de $\mathcal{V}$ em um processo de murchamento osmótico para vários tempos característicos τ_{osm} . A geometria inicial bicôncava com $\mathcal{A} = 4\pi$ e $v = 0.8$ é exibida acima do gráfico para $t = 0$. Sua área é mantida constante e é imposto um volume $\mathcal{V}_{\text{eq}}$ tal que o volume reduzido final seja $v_{\text{eq}} = 0.5$. As formas de equilíbrio (em escala) ao tempo *final* de cada simulação são postas da esquerda para direita em ordem crescente de tempo característico τ_{osm} : 10^{-2} , 10^{-1} , 10^{+0} e 10^{+1} .

Figura 4.9: Evolução de $\mathcal{E}$ em um processo de murchamento osmótico para vários tempos característicos τ_{osm} . Para os tempos característicos $\tau_{\text{osm}} = 10^{-1}$ e $\tau_{\text{osm}} = 10^{+0}$ há autointerseção membranal, ao passo que para $\tau_{\text{osm}} = 10^{-2}$ a membrana não se autointersecta, mas está na iminência de fazê-lo.

A seguir apresentamos um experimento numérico que é uma combinação natural e imediata dos dois últimos tópicos: osmose em superfícies de gênero um. A geometria toroidal é novamente o toro de Clifford, com volume-alvo osmótico $\mathcal{V}^*$ imposto a 65% de seu volume original e tempo osmótico característico $\tau_{\text{osm}} = 2 \cdot 10^{-2}$. A curva de energia, a geometria ao tempo final simulado, e a condição inicial estão na Figura 4.10. Há ainda uma vista em detalhe da malha nas imediações do orifício da superfície. Nela, é possível notar vários elementos triangulares de tamanho diminuto (obtida a $c_h = 0.25$). O que ocorre é que sem uma boa resolução espacial (quer dizer, se $c_h > 0.25$), a geometria de contorno do orifício não é bem capturada. Por outro lado, uma resolução ligeiramente mais alta ($c_h \approx 0.30$) também impede que a simulação seja executada com êxito – dada a existência das persistentes velocidades “parasitas” (e então do processo mandatório de remalhagem e, consequentemente, da própria relaxação de malha a cada vez que este é realizado).

Situações nas quais a membrana recebe a aplicação de forças externas são ainda mais interessantes do que a dinâmica de relaxação em topologias distintas ou osmose. À elas dedicamos os próximos relatos; iniciamos pelas forças tangenciais e depois passamos às forças normais de pinçamento.

Figura 4.10: Murchamento osmótico de um toro de Clifford a 65% de seu volume inicial e respectiva curva de energia $\mathcal{E}$ a parâmetros materiais $\mu = 1$ e $c_{\text{CH}} = 1$ e tempo osmótico característico $\tau_{\text{osm}} = 2 \cdot 10^{-2}$.

Membranas de área variável: $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} \neq 0$

Até agora discutimos membranas viscosas inextensíveis. No entanto, nossa formulação permite também de imediato o tratamento numérico de casos nos quais $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} \neq 0$. Para tanto, seja s uma função conhecida dada tal que $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} = s$. Assim sendo, (4.17) torna-se

$$\int_{\Gamma} \xi \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} d\Gamma = \int_{\Gamma} s \xi d\Gamma. \quad (4.58)$$

Do ponto de vista discreto, portanto,

$$\int_{\Gamma^n} \xi \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u}_h^{n+1} d\Gamma + \int_{\Gamma^n} \gamma_h (\nabla_\Gamma \pi_h^{n+1} - \mathbf{g}_h^n) \cdot \nabla_\Gamma \xi d\Gamma = \int_{\Gamma^n} s \xi d\Gamma, \quad (4.59)$$

com SPGP, como antes. Se função s tem imagem positiva, a membrana tem sua área aumentada, por exemplo, pela adição de lipídios (Staykova *et al.*, 2011), ao passo que se a imagem de s é negativa, há diminuição de área superficial da bicamada lipídica.

Como exemplo ilustrativo, o caso mais simples possível foi escolhido: s é uma função de valor constante, em particular, $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} = s = -0.5$ em todo o domínio membranal. A geometria inicial é prolata e de volume reduzido $\nu = 2/3$ (e agora com o *volume* inicial preservado ao longo da dinâmica, *i.e.*, $\mathcal{V}^* = \mathcal{V}_0$ como já definido com controlador de volume). O resultado é apresentado na Figura 4.11. A redução de área superficial é de $4\pi \approx 12.56$ para 9.6 ($\approx 12\%$), valor final este atingido de modo que $\nu = 0.99$. Em equilíbrio esférico, a área não pode se reduzir ainda mais sem que haja alteração também de volume (que está fixo, aliás) e então surgem oscilações na geometria discreta de malha. Outras geometrias e valores de s também foram estudados, mas como se $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} \neq 0$ a auto-interseção se torna inevitável, tais resultados são omitidos por não contarmos com um algoritmo de auto-colisão membranal.

Figura 4.11: Evolução geométrica a $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} = s = -0.5$ de uma membrana inicialmente prolata em direção a uma esfera; parâmetros materiais $\mu = 1$ e $c_{CH} = 1$.

Força tangencial & deformação normal

A ideia é simplesmente mostrar que forças tangenciais acabam por gerar deformações na direção normal, assim como relatado por Rahimi & Arroyo (2012).

Para aplicar uma força tangencial em uma pequena parcela membranal $\check{\Gamma} \subset \Gamma$, introduzimos em uma região *fixa* no espaço, uma força de fricção $\mathcal{F}_{\text{atr}}$, a saber

$$\mathcal{F}_{\text{atr}} = \int_{\check{\Gamma}} \beta_{\text{atr}} (\mathbf{u}_{\text{atr}} - \mathbf{u}^{n+1}) \cdot \mathbf{v} d\check{\Gamma}, \quad (4.60)$$

em que, $\mathbf{u}_{\text{atr}}$ é fixo e vale $\mathbf{u}_{\text{atr}} = u_{\text{atr}} \check{\mathbf{e}}_z$, sendo $\check{\mathbf{e}}_z$ o versor unitário (adimensional) na direção z . Do ponto de vista numérico, é importante ressaltar também que o termo em $\mathbf{u}^{n+1}$ presente em (4.60) deve ser adicionado a matriz proveniente do primeiro membro da equação de momento – equação (4.24). Para uma membrana de formato aproximadamente cilíndrico alinhada com a direção z e com a velocidade $\mathbf{u}_{\text{atr}} = u_{\text{atr}} \check{\mathbf{e}}_z$, a equação (4.60) resulta em uma força aproximadamente tangencial, como queremos.

Na simulação elegida, os parâmetros β_{atr} e u_{atr} foram ambos escolhidos a valor 10^3 e duas pinças⁶ seguram fixas as extremidades membranais. O resultado é exibido na Figura 4.12. No extremo esquerdo, a geometria inicial (cuja região circular refinada de raio 0.05 é aquela na qual a força de atrito foi aplicada). No extremo direito, vista em detalhe que revela que o atrito viscoso na direção tangencial acaba por gerar forças normais elásticas. Grosso modo, a parcela membranal derrapa e sobe ao sair da região de grande atrito.

Figura 4.12: Força tangencial localizada ($r = 0.05$, região refinada, forma à esquerda) produzindo deformações normais e “derrapagem” membranal (detalhe à direita).

⁶Tema do próximo tópico. Por ora, as pinças são apenas simples fixadoras de extremidades.

4.2.2. Pinçamento membranal

Motivação e modelagem física

A aplicação de forças extremamente localizadas em membranas fosfolipídicas são responsáveis pela formação de tubos de fino calibre chamados *tethers*. Tais estruturas cilíndricas podem ser bastante extensas e de diâmetro nanométrico (Smith *et al.*, 2004). Uma das formas de provocá-las é com o uso de dispositivos denominados pinças ópticas (Ashkin, 1997; Lee *et al.*, 2008), verdadeiras “armadilhas de luz” que permitem manipular pequenas parcelas membranais (Waugh, 1982a,b; Božič *et al.*, 1997). Essa é a motivação para essa subseção.

O princípio fundamental de funcionamento das pinças ópticas é o efeito de polarização provocado por um campo elétrico de alto gradiente. Permitem manipular pequenos objetos dielétricos e, com, eles, até mesmo células vivas (Pontes *et al.*, 2013).

A dinâmica da formação de um *tether* pode ser entendida com o auxílio da solução analítica em simetria cilíndrica ora vista na seção anterior, tomando-a como caso ideal. Um *tether* se desenvolve quando uma pequena parcela da membrana é submetida à uma força, formando uma estrutura composta por uma cabeça, um tubo cilíndrico de comprimento $L(t)$ e raio $R(t)$ e uma conexão com o corpo da membrana, como representado na Figura 4.13.

Para um tempo $t \gg \tau$ espera-se um equilíbrio dinâmico no qual o *tether* segue uma translação de movimento rígido na direção da força de módulo constante e igual a F . Ainda na Figura 4.13 observamos que à esquerda do ponto b (o qual está aproximadamente fixo no espaço) o material membranal deforma-se para adquirir a forma cilíndrica característica. Uma vez que uma certa parcela de membrana transpassa o ponto b e começa a fazer parte do *tether*, ela simplesmente passa a se mover com velocidade constante. A propósito, a velocidade de afastamento V é determinada pelo balanço entre a força aplicada F (constante) e as tensões viscosas localizadas na região em que o *tether* conecta-se ao corpo da membrana. Idealmente, um *tether* pode ser visto como uma membrana cilíndrica (circular) inextensível. Nesse caso, uma solução analítica pode ser obtida, deveras descrita no Apêndice E.

A partir de agora, *voltamos a quantidades dimensionais* e consideramos uma membrana de viscosidade superficial μ e módulo de rigidez de Canham-Helfrich constante c_{CH} sendo pinçada por uma força externa axial F_T . Para essa geometria em particular, a solução analítica do problema contínuo (BSCH-FV) conta com tensões radial e axial *uniformes* (independentes de $\mathbf{x}$). O campo de velocidade exato é dado por⁷

$$\mathbf{u} = U_r \check{\mathbf{e}}_r + a z \check{\mathbf{e}}_z \quad (4.61)$$

⁷Ver Apêndice E.

Figura 4.13: Modelagem física de uma grande elongação cilíndrica de uma parcela membranal, em inglês chamada de *membrane tethering*.

com U_r e a dados por

$$U_r = -\frac{1}{8\pi\mu} \left[F_T - 2\pi c_{\text{CH}} \frac{1}{R} \left(1 + \frac{p R^3}{c_{\text{CH}}} \right) \right], \quad (4.62)$$

$$a = \frac{1}{8\pi\mu R} \left[F_T - 2\pi c_{\text{CH}} \frac{1}{R} \left(1 + \frac{p R^3}{c_{\text{CH}}} \right) \right]. \quad (4.63)$$

Negligenciando a contribuição da pressão interna p , e sabendo-se que

$$\frac{dR}{dt} = U_r, \quad (4.64)$$

chegamos a uma equação mais simples

$$\frac{dR}{dt} = \frac{c_{\text{CH}}}{4\mu} \left(\frac{1}{R_{\text{eq}}} - \frac{1}{R(t)} \right). \quad (4.65)$$

Existe um *raio de equilíbrio* R_{eq} dado por

$$R_{\text{eq}} = \frac{2\pi c_{\text{CH}}}{F_T}, \quad (4.66)$$

para o qual o cilindro tende à medida que $t \rightarrow \infty$. No equilíbrio, a tensão superficial π_s assume o valor

$$\pi_{s,\text{eq}} = -\frac{F_T}{4\pi R_{\text{eq}}} = -\frac{F_T^2}{8\pi^2 c_{\text{CH}}}.$$

Ademais, o “decaimento” final para $R \approx R_{\text{eq}}$ tem o comportamento assintótico

$$R(t) = R_{\text{eq}} + C \exp\left(-\frac{c_{\text{CH}}}{4\mu R_{\text{eq}}^2} t\right), \quad (4.67)$$

com tempo característico de relaxação dado por

$$\mathcal{T} = \frac{4\mu R_{\text{eq}}^2}{c_{\text{CH}}} = \frac{16\pi^2 \mu c_{\text{CH}}}{F_T^2}. \quad (4.68)$$

Para $t \gg \mathcal{T}$ o *tether* é esperado estar em um equilíbrio de translação de movimento rígido ao longo da linha de F_T . O material deforma-se para adquirir a forma cilíndrica na região do ponto b na Figura 4.13, o qual está aproximadamente fixo no espaço (o começo do *tether*). Uma vez que o material adentra ao *tether*, ele simplesmente se move a velocidade constante ao longo dele. O fim do *tether* (ponto e) move-se a velocidade constante U_T determinada pelo balanço de forças aplicadas e tensões viscosas na região de conexão entre o *tether* e o corpo da membrana. Em quantidades *adimensionais*, o raio de equilíbrio e o tempo de relaxação do *tether* são dados por

$$R_{\text{eq}} = \frac{2\pi}{F_T} \quad \text{e} \quad \mathcal{T} = \frac{16\pi^2}{F_T^2}. \quad (4.69)$$

Resta-nos dizer como modelá-lo numericamente.

Modelagem numérica

As pinças numéricas implementadas mimetizam forças externas superficiais $\mathbf{f}$ geradas por pinças ópticas. Cada uma delas possui raio r_T , fixo no tempo, cuja posição espacial de seu centro segue uma “trajetória discreta” descrita pelos vetores $\mathbf{x}_T^0, \mathbf{x}_T^1$, etc.

Dado um ponto $\mathbf{x}$ em $\mathbb{R}^3$, a penetração da pinça no ponto $\mathbf{x}$ ao tempo t_{n+1} , denotada por $w^{n+1}(\mathbf{x})$, é definida como

$$w^{n+1}(\mathbf{x}) \doteq r_T - \|\mathbf{d}_T^{n+1}(\mathbf{x})\|, \quad (4.70)$$

em que

$$\mathbf{d}_T^{n+1}(\mathbf{x}) \doteq \mathbf{x} - \mathbf{x}_T^{n+1}. \quad (4.71)$$

A força repulsiva que a pinça exerce em $\mathbf{x}$ depende exponencialmente de $w^{n+1}(\mathbf{x})$ de acordo com

$$\mathbf{f}^{n+1}(\mathbf{x}) = k_T \frac{e^{w^{n+1}(\mathbf{x})/\ell_T}}{\|\mathbf{d}_T^{n+1}(\mathbf{x})\|} \mathbf{d}_T^{n+1}(\mathbf{x}). \quad (4.72)$$

Em um cenário exato, essa força teria que ser integrada sobre $\mathbf{x} \in \Gamma^{n+1}$. Infelizmente, como ela é necessária ao calcular $\mathbf{u}_h^{n+1}$ por meio de (4.24), nós a integramos em Γ^n . Poderíamos substituir $\mathbf{f}^{n+1}$ simplesmente por $\mathbf{f}^n$ em (4.24), mas a seguinte aproximação tem um comportamento muito mais estável

$$\mathbf{f}^{n+1}(\mathbf{x}) = k_T \frac{e^{w^{n+1}(\mathbf{x})/\ell_T}}{\|\mathbf{d}_T^n(\mathbf{x})\|} \mathbf{d}_T^n(\mathbf{x}) - k_T \frac{(\Delta t)_n e^{w^n(\mathbf{x})/\ell_T}}{\ell_T \|\mathbf{d}_T^n(\mathbf{x})\|^2} (\mathbf{d}_T^n(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{d}_T^n(\mathbf{x})) \mathbf{u}_h^{n+1}(\mathbf{x}). \quad (4.73)$$

Note que o último termo em (4.73) é uma linearização implícita que deve ser adicionada a matriz proveniente do primeiro membro de (4.24). Aos parâmetros k_T e ℓ_T são dados os valores 10^5 e $r_T/50$, respectivamente.

A pinça numérica pode ser movida especificando-se ou a velocidade ou a força total exercida sobre a membrana. No primeiro caso, a regra de atualização é simplesmente

$$\mathbf{x}_T^{n+1} = \mathbf{x}_T^n + \Delta t \mathbf{U}_T^{n+1}, \quad (4.74)$$

em que $\mathbf{U}_T$ é a velocidade imposta de pinçamento. No caso no qual a força é imposta, uma simples retroalimentação ajusta $\mathbf{U}_T^{n+1}$ de modo a impor o valor alvo da força.

A Figura 4.14 ilustra nossa estratégia de pinçamento, descrevendo uma situação em que seis pinças agem simultaneamente empurrando a membrana de dentro para fora.

Figura 4.14: Uma ilustração de pinçamento no qual agem 6 pinças.

Em posse da pinça numérica, surge a possibilidade de se responder a questão: como o pinçamento afeta a forma membranal?

Efeitos dinâmicos de forma

Ao contrário do escoamento gradiente, o escoamento viscoso aqui apresentado pode lidar com efeitos dinâmicos em situações fora de equilíbrio. Particularmente, há a questão de como são os efeitos de forma membranal a depender da velocidade de pinçamento. Isso é estudado como descrito a seguir.

Consideramos uma forma de equilíbrio oblata com volume reduzido $v \approx 0.66$. Um pinça numérica de constantes

$$r_T = 0.04, \quad k_T = 10^5, \quad \ell_T = \frac{r_T}{50} \quad (4.75)$$

é colocada em $\mathbf{x}_T(t=0)$ no interior da superfície, próxima a ela, e movida a uma velocidade constante U_T na direção da normal exterior. As simulações são realizadas até um tempo T de maneira que o deslocamento da pinça seja $D_T = \|\mathbf{x}_T(T) - \mathbf{x}_T(0)\| = U_T T = 1.0$, isto é, um deslocamento (adimensional) da pinça igual a 1.0 para todos os casos. Já que o uso de apenas uma pinça basta para o objetivo, os movimentos rígidos são filtrados utilizando-se multiplicadores de Lagrange (assim como nos casos de relaxação).

Diferentes formas da membrana para vários valores de velocidade de pinçamento U_T são mostrados na Figura 4.15 à diferentes posições da pinça (deslocamento D_T). A coluna no extremo esquerdo da figura corresponde à menor velocidade, $U_T = 1$. Neste caso a membrana se desloca quasi-estaticamente, sem exibir qualquer resposta localizada ao pinçamento. Para uma velocidade $U_T = 10$ a pinça começa a ser notada empurrando a membrana de dentro para fora. Mas é somente para $U_T = 100$ e $U_T = 1000$ que o tamanho da pinça ($r_T = 0.04$) torna-se realmente aparente e a pinça produz um *tether*.

Considerando apenas a última linha da Figura 4.15, para a qual a posição da pinça é exatamente a mesma (e o centro de massa também, graças à eliminação de movimentos rígidos), torna-se evidente a habilidade do método proposto em capturar deformações dependentes da velocidade. Indo além, surge a questão de como o método proposto se comporta na captura do equilíbrio dinâmico de um *tether* (sob mudanças repentinas de força, por exemplo).

Equilíbrio dinâmico

Avaliamos agora a habilidade do método em prever corretamente o equilíbrio dinâmico de um *tether*. Para tanto, tomamos um *tether* já formado e em equilíbrio para $F_T = 400$ e então repentinamente alteramos o valor dessa força. Duas simulações foram realizadas alterando o valor de F_T para 500 e 600. O tempo $t = 0$ corresponde ao instante no qual ocorre a repentina mudança de força. A malha é adaptativamente refeita utilizando-se $c_h = 1/2$ resultando em malhas relativamente grossas ($h \approx R_{eq}/2$). Após pós-processar a malha é possível computar o raio do *tether* como função do tempo, assim como exibido na Figura 4.16. O raio

Figura 4.15: Efeitos dinâmicos de pinçamento. A deformação de uma forma oblata para a qual $v \approx 0.66$ para uma pinça de raio $r_T = 0.04$ movendo-se em direção ao exterior com velocidade constante U_T (verticalmente). Mostramos as formas da membrana para diferentes valores de deslocamento da pinça $D_T = 0.1, 0.4, 0.7$ e 1.0 , e para $U_T = 1, 10, 100$ e 1000 .

de equilíbrio inicial exato é $R_{eq}(F_T = 400) = 0.0157$, o qual é razoavelmente aproximado pelo método tendo em conta que a malha é bastante grossa.

Após alterar a força para $F_T = 500$, o raio do *tether* encolhe para ≈ 0.013 , o qual representa uma boa aproximação para $R_{eq}(F_T = 500) = 0.0126$. A *evolução temporal* em direção ao novo raio de equilíbrio está em bom acordo com uma exponencial da forma $ae^{-t/\mathcal{T}} + b$, em que $\mathcal{T} = 6.32 \times 10^{-4}$ é dado por (4.69), como mostrado pela curva contida na Figura 4.16.

O mesmo procedimento foi conduzido, mas para uma nova força de $F_T = 600$, para o qual os valores exatos de radio são $R_{eq}(F_T = 600) = 0.0105$ e $\mathcal{T} = 4.39 \times 10^{-4}$. De modo geral, a relaxação em direção ao raio de equilíbrio está de boa com a solução analítica (embora melhor no caso $F_T = 500$ do que $F_T = 600$). O raio de equilíbrio é predito com um erro de aproximadamente 5%, um valor razoável considerando que apenas 12 elementos integram a circunferência do *tether*.

Robustez

Esta última seção trata de experimentos no quais várias pinças são aplicadas simultaneamente à membrana. Isso visa testar a robustez do método proposto.

A partir de uma membrana esférica de área 4π (*i.e.*, tomando R_0 como o raio da esfera inicial), 6 pinças independentes de raio $r_T = 0.1$ movem-se radialmente em direção ao exterior com velocidade $U_T = 100$. As posições iniciais das pinças são dadas pela interseção da membrana com os 6 semi-eixos cartesianos.

Embora usualmente os valores impostos de área e volume são tomados como constantes ($\mathcal{A}^*$ e $\mathcal{V}^*$), nestes experimentos eles são funções do tempo

$$\mathcal{A}^*(t) = 4\pi + 400t, \quad (4.76)$$

$$\mathcal{V}^*(t) = \frac{4\pi}{3} - 50t. \quad (4.77)$$

Com essas funções do tempo, não pretendemos simular um fenômeno físico, senão que queremos ilustrar a robustez do método. A despeito disso, um volume interior dependente do tempo poderia resultar de uma pressão osmótica variável exercida pelo fluido circundante (embora não muito grande, caso contrário a membrana se romperia), enquanto que a variação temporal de área poderia representar a adição de lipídios à membrana, como de fato Staykova *et al.* (2011) relatam em seu experimento.

Ao longo da simulação, o passo de tempo foi continuamente ajustado segundo (4.41) e o procedimento adaptativo de remalhagem foi aplicado com parâmetro $c_h = 0.5$. O raio de equilíbrio segundo a evolução membranal é mostrado na Figura 4.17. As pinças parecem emergir da esfera primeiramente deformando a membrana em algo como um octaedro aproximado (em $t \approx 0.005$) e então esticando-o em um formato do tipo estrela. Como já dissemos, embora existam mecanismos que possam criar protuberâncias como essas da Fi-

Figura 4.16: Dinâmica do raio do *tether* quando a força é alterada. Para um *tether* em equilíbrio quando se tem $F_T = 400$, a força é alterada para $F_T = 500$ ou $F_T = 600$ em $t = 0$. Os círculos correspondem aos resultados numéricos obtidos com o método proposto, e a curva diz respeito a um ajuste exponencial com tempo característico dado por (4.69). À direita, o valor exato do raio de equilíbrio para o caso cilíndrico ideal é indicado com um pequeno segmento azul, como preconiza (4.69).

gura 4.17 em células vivas ou lipossomas (Fygenon *et al.*, 1997; Staykova *et al.*, 2013), esse resultado não pretende simular um fenômeno físico específico.

Na Figura 4.18 a evolução temporal de várias quantidades são exibidas. A energia parece aumentar monotonicamente ao longo da deformação, com a área superficial e o volume interior indo em direção aos seus valores alvo $\mathcal{A}^*(t)$ e $\mathcal{V}^*(t)$ de forma bastante razoável. As forças exercidas por cada um das 6 pinças são também exibidas na Figura 4.18. Elas diferem umas das outras até $t \approx 0.005$, instante esse no qual a membrana fixa-se no espaço e então todas as pinças começam a se comportar da mesma maneira. Notar as fortes perturbações introduzidas pela remalhagem. Elas são resultado de pequenas mudanças na penetração de cada pinça quando a nova malha é construída. Não obstante, o algoritmo proposto é suficientemente robusto para que tais perturbações se dissipem bastante rapidamente.

Por fim, alguns dados computacionais desta simulação. O passo de tempo e o menor tamanho de elemento $h_{\min}$ são exibidos como função do tempo na Figura 4.19. Exibimos também as qualidades de forma e tamanho da malha, Q_f e Q_t , como funções do tempo na Figura 4.20. A malha inicial consiste de 2160 elementos e 1082 nós, e a final possui 5128 elementos e 2566 nós. A simulação completa possui 1525 passos de tempo e gastou 29 minutos de processamento em um *notebook* com processador Intel® Core™ i7 de 2.8 GHz. O sistema linear foi resolvido por fatoração LU utilizando-se a biblioteca MUMPS (Amestoy *et al.*, 2001, 2006), requerindo uma memória RAM requerida de 2 GBytes.

Figura 4.17: Evolução da forma membranal ao longo de uma simulação com 6 pinças. A forma da membrana é exibida em instantes equiespaçados em intervalos de tempo de 0.8×10^{-3} . A escala de cores representa o valor da curvatura média escalar κ_h .

Figura 4.18: Curvas de energia, área superficial, volume interior e de cada uma das forças das 6 pinças como função do tempo. Valor real e valor alvo correspondem às quantidades $\mathcal{A}$, $\mathcal{V}$ e $\mathcal{A}^*$, $\mathcal{V}^*$.

Figura 4.19: Curvas de Δt e $h_{\min}$ como função do tempo para a simulação de 6 pinças simultâneas.

Figura 4.20: Curvas de Q_f e Q_t como função do tempo para a simulação de 6 pinças simultâneas.

4.3. Observações finais

Introduzimos um esquema discreto semi-implícito de elementos finitos para simulação de membranas viscosas com energia de flexão do tipo Canham-Helfrich. A membrana é discretizada por uma malha superficial de triângulos planos, sobre a qual uma formulação mista de velocidade-curvatura-pressão é construída com interpolantes P_1 para todos os campos. Dois termos de estabilização são incorporados na formulação discreta: o primeiro diz respeito à inextensibilidade por projeção de gradiente de pressão, enquanto que o segundo acopla curvatura velocidade de modo a viabilizar a estabilidade temporal. A restrição de volume constante é tratada utilizando-se um multiplicador de Lagrange (o qual resulta ser a pressão interior), e uma estratégia análoga é usada para eliminação de movimentos rígidos. Controladores de área superficial e o volume interior são utilizados para evitar que tais quantidades se desviem de seus respectivos valores-alvo. As posições nodais são atualizadas lagrangianamente e uma estratégia de remalhagem adaptativa automática é empregada a fim de se manter dinamicamente a qualidade de malha.

O método proposto foi avaliado por meio de extensivos experimentos numéricos de relaxação e também de osmose. Na prática, e por meio de comparação com soluções analíticas ou quasi-analíticas, ambas para equilíbrio estático, o método resultou ser convergente e robusto, com restrição de passo de tempo de ordem $\mathcal{O}(h^2)$. Para uso prático em se tratando especialmente de refinamento de malha, fornecemos ainda uma regra empírica para escolha do máximo passo de tempo em função de h . Outros experimentos numéricos ilustram outras potenciais aplicações do método: osmose, membranas de área superficial variável e emprego de forças externas tangenciais (inclusive em superfícies de gênero não-nulo).

Como contribuição à parte, um algoritmo de pinçamento virtual foi também especialmente idealizado para o estudo de formação e extensão de *tethers*. Incorporando-o ao método proposto, fomos capazes de prever corretamente o equilíbrio dinâmico de *tethers*. Ademais, com respeito ao pinçamento, também foi investigada a dependência membranal de forma. Nesse aspecto, nossos resultados revelaram que finas elongações cilíndricas surgem somente quando a velocidade de pinçamento é relativamente alta em comparação com a velocidade característica de relaxação (caso contrário a evolução é quasi-estática).

Como desafios ainda a serem resolvidos ainda permanecem a restrição temporal de ordem $\mathcal{O}(h^2)$ e as pequenas velocidades tangentes que em equilíbrio estático continuamente deterioram a qualidade de malha (problema este atualmente contornado via remalhagem).

A seguir, como último tópico, adentramos à discussão e abordagem numérica de membranas viscosas com *borda*.

One of my favourite places to visit is the two-dimensional world described in Edwin Abbott's mathematical fantasy, Flatland. I am now a hexagon in two-dimensional space and can only perceive the edges of other objects.

Sheldon L. Cooper

Capítulo

5

Superfícies viscosas com rigidez de curvatura e *borda*

Além de serem o bloco fundamental de interfaces celulares, os fosfolipídios são encontrados também em partículas chamadas lipoproteínas. Composto várias enzimas, antígenos e até mesmo toxinas, as lipoproteínas são constituídas de uma estrutura fosfolipídica em bicamada, mas adicionalmente também possuem uma cadeia proteica fechada em seu contorno. Uma representação esquemática de uma lipoproteína é dada na Figura 5.1 (à esquerda), na qual exibimos seu papel como câmara transportadora de colesterol.

O presente capítulo surge à parte exatamente pela necessidade adicional de se discutir e modelar essa cadeia proteica presente no contorno das lipoproteínas, certamente hoje um dos focos das pesquisas em membranas biológicas com *borda*. Sua estabilidade estrutural e morfologia são tão relevantes quanto as que correspondem às formas lipossomais até agora abordadas. Fora do equilíbrio, e ainda que só do ponto de vista puramente mecânico¹, tampouco sua dinâmica estrutural é conhecida por completo. Assim sendo, e assim como antes, nossa motivação para o estudo de tais estruturas se dá tanto na natureza de sua dinâmica como na estabilidade de equilíbrio estáticos das lipoproteínas.

5.1. Motivação biológica e modelagem

Quanto à modelagem em si, e de interesse especial à saúde humana, destacam-se as lipoproteínas as que compõem o sangue, principalmente o LDL (*low-density lipoprotein*) e o HDL (*high-density lipoprotein*). Uma representação pictórica desses dois tipos de transportadores de colesterol é exibida na Figura 5.1 (à direita). No caso do HDL tem-se o chamado

¹Há situações em que fenômenos de natureza química ou eletromagnética são cruciais (respectivamente, por exemplo, nos motores moleculares e nos canais iônicos).

“transporte reverso”, o que lhe confere o título de “colesterol bom”, exatamente pelo fato de ele sequestrar colesterol de outras lipoproteínas (*e.g.*, LDL) e levá-las para degradação no fígado. No que se refere a seus efeitos a saúde, uma comparação bem-humorada do HDL e do LDL é exibida na Figura 5.2.

Figura 5.1: À esquerda: descrição de uma lipoproteína quanto aos seus componentes; à direita: tipos de lipoproteínas: HDL, LDL, VLDL, Chylomicron. Fonte: <https://www.mabtech.com/sites/default/files/2013-apolipoproteins-web.pdf> – acessada em 21 de abril de 2015.

Figura 5.2: Ação do “bom” colesterol (HDL) e do “mau” colesterol (LDL). Fonte: <https://www.smartlivingnetwork.com/cholesterol/b/good-cholesterol-vs-bad-cholesterol/> – acessada em 9 de novembro de 2014.

Na Figura 5.3 exibimos a biogênese de formação do HDL. Em (a) está o componente primário do HDL, a cadeia proteica que é sintetizada no fígado e posteriormente excretada no sangue, nesse momento ainda sem qualquer molécula lipídica. Ao entrar em circulação, ela captura lipídios, que agregados formam o HDL discoidal disposto em (b). Por fim, a esterificação do colesterol e a contínua absorção de moléculas lipídicas realizam a forma final esférica do HDL – Figura 5.3 (c).

Figura 5.3: Biogênese do HDL por ocasião do transporte reverso de colesterol: (a) cadeia proteica; (b) HDL discoidal; (c) HDL esférico. Os fosfolipídios tem um comprimento de ≈ 2 nm e as proteínas um diâmetro de ≈ 30 nm. Esta figura foi adaptada de Shih *et al.* (2008).

Nosso interesse está na mecânica do HDL discoidal, justamente por ele ser o exemplo de ente biológico motivador para o estudo de superfícies de contorno elástico. Do ponto de vista de modelagem, para tanto, há de ser incorporada a física da cadeia proteica presente na borda. Em termos energéticos, o contorno apolipoproteico γ é modelado como uma barra *inextensível* unidimensional e livre de torção², cuja densidade de energia livre é

$$\varphi = \frac{1}{2} \alpha \varkappa^2 + \frac{1}{2} \beta (\varkappa')^2, \quad (5.1)$$

em que $\varkappa$ é a curvatura da curva γ , α é a rigidez flexural da apolipoproteína e o termo em $\varkappa'$ (derivada de $\varkappa$ com relação ao comprimento de arco) modela custos energéticos associados à grandes variações locais de curvatura de *kinks* da cadeia de apolipoproteína. Por simplicidade adotaremos $\beta \equiv 0$.

Adicionando-se (5.1) à densidade de energia de Canham-Helfrich, equação (3.1), e considerando-se uma tensão superficial σ *uniforme*, resulta o modelo de “Euler-Canham-Helfrich”, que à parâmetros materiais constantes é

$$\mathcal{E}_{\text{ECH}}(\Gamma) = \frac{c_{\text{CH}}}{2} \int_{\Gamma} \kappa^2 d\Gamma + c_{\text{G}} \int_{\Gamma} K d\Gamma + \int_{\Gamma} \sigma d\Gamma + \frac{\alpha}{2} \int_{\gamma} \varkappa^2 d\gamma. \quad (5.2)$$

Para fixar ideias e discutir sua modelagem, na Figura 5.4 exibimos uma representação ideal do HDL discoidal que resume a física modelada do ponto de vista estrutural.

²Remonta ao ensaio *Euler's investigation of the Elastica*.

Figura 5.4: Representação físico-matemática de uma partícula de HDL discoidal. Fonte: cortesia de Eliot Fried.

Em detrimento ao que anteriormente expomos em (3.3), o termo que envolve a curvatura gaussiana K não mais resulta em uma simples constante. Novamente via teorema de Gauss-Bonnet (ver Apêndice C) surge agora a curvatura geodésica κ_g e assim

$$\mathcal{E}_{\text{ECH}}(\Gamma) = \frac{c_{\text{CH}}}{2} \int_{\Gamma} \kappa^2 d\Gamma + \int_{\Gamma} \sigma d\Gamma + \frac{1}{2} \int_{\gamma} (\alpha \kappa^2 - c_G \kappa_g) d\gamma, \quad (5.3)$$

em que, como antes, desconsideramos a constante aditiva³ $2\pi\mathcal{X}(\Gamma)c_G$ pois à topologia fixa esta não influencia na minimização do funcional $\mathcal{E}(\Gamma)$.

Segundo nos consta, não há uma equação que seja útil do ponto de vista *numericamente* e que forneça a derivada de forma da energia $\mathcal{E}_{\text{ECH}}(\Gamma)$ dada por (5.3). Ocorre que trata-se de um tema relativamente novo⁴ e que *nós* necessitamos (dada uma possível extensão natural do método proposto no capítulo anterior). Sem ter a derivada de forma exata expressa de modo computável, optamos por utilizar (5.2) em vez de (5.3). Essa escolha mantém a curvatura gaussiana K como incógnita do problema, a qual no entanto pode ser calculada por meio de métodos de geometria computacional discreta. Não contamos com uma equação numericamente útil para computar a derivada da energia de forma de (5.2) para membranas *abertas* (para só então discretizá-la) senão que nosso ponto de partida é diretamente a *derivada numérica* de $\mathcal{E}_{\text{ECH}}(\Gamma)$. Trata-se de uma extensão da proposta de elementos finitos de Tasso & Buscaglia (2013), que consiste no uso inteligente de uma estratégia típica de mecânica de *sólidos* para simular membranas *fluidas*. Suas principais ideias são discutidas muito brevemente a seguir, pois estão publicadas (Tasso & Buscaglia, 2013). Nosso adendo é o tratamento numérico do caráter elástico e inextensível de γ .

³A característica de Euler de uma superfície Γ é denotada por $\mathcal{X}(\Gamma)$ e está definida no Apêndice C. Para superfícies com borda, $\mathcal{X} = 1$.

⁴A versão *escalar* da derivada de forma para superfícies *fechadas* é há tempos conhecida, mas sua análoga *vetorial* foi deduzida recentemente (Bonito *et al.*, 2010).

5.2. Formulação variacional

5.2.1. Dinâmica de membranas elásticas: princípio do trabalho virtual

Para uma membrana elástica de inércia não-desprezível, o princípio do trabalho virtual estabelece que a potência virtual das forças internas é igual ao negativo da derivada da energia elástica com respeito aos graus de liberdade $\underline{\mathbf{X}}$ (vetor de posições nodais em elementos finitos lagrangianos), *i.e.*,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{E}_e(\underline{\mathbf{X}}^0, \underline{\mathbf{X}}^t + \epsilon \underline{\mathbf{w}}) - \mathcal{E}_e(\underline{\mathbf{X}}^0, \underline{\mathbf{X}}^t)}{\epsilon} + \int_{\Gamma(t)} \rho \underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\mathbf{w}} d\Gamma = 0, \quad (5.4)$$

em que $\Gamma(t)$ é a superfície que a membrana ocupa ao tempo t , ρ é a massa específica superficial, $\underline{\mathbf{a}}$ é a aceleração e $\mathcal{E}_e$ é uma certa energia elástica considerada. A configuração $\underline{\mathbf{X}}^t + \epsilon \underline{\mathbf{w}}$ é obtida perturbando-se a posição da interface Γ ao longo do campo de velocidade virtual $\underline{\mathbf{w}}$ (em elementos lagrangianos, tipicamente, a um dado tempo, nó-a-nó) e cuja configuração de referência é $\underline{\mathbf{X}}^0$. Se os nós da malha de elementos finitos lineares possuem índices $m = 1, \dots, M$, de (5.4) resulta um sistema não-linear de $3M$ equações diferenciais ordinárias para as posições nodais $\underline{\mathbf{X}}^t$, já que as acelerações nodais são dadas por $d^2 \underline{\mathbf{X}}^t / dt^2$. Para construí-las, como de maneira habitual, $\underline{\mathbf{w}}$ é sucessivamente tomado como

$$\underline{\mathbf{w}} = \check{\mathbf{e}}_i N_{(m)}, \quad i = 1, 2, 3; \quad m = 1, \dots, M, \quad (5.5)$$

em que $N_{(m)}$ denota a função base no elemento de referência ou elemento *master*. Isso posto, definimos a discretização espacial como se segue.

5.2.2. Problema discreto no espaço a tempo contínuo

Para $t > 0$, encontrar $(\underline{\mathbf{X}}^t, \underline{\mathbf{U}}^t)$ que para todo i (dimensão espacial) e todo m (índice nodal):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\underline{\mathbf{X}}^t}{dt} - \underline{\mathbf{U}}^t = 0, \\ \frac{\mathcal{E}_e(\underline{\mathbf{X}}^0, \underline{\mathbf{X}}^t + \epsilon \underline{\mathbf{D}}_{(i,m)}) - \mathcal{E}_e(\underline{\mathbf{X}}^0, \underline{\mathbf{X}}^t)}{\epsilon} + \sum_{l=1}^M A_{ml} \frac{dU_{(l)i}^t}{dt} = 0, \end{array} \right. \quad (5.6)$$

em que

$$\underline{\mathbf{D}}_{(i,m)} = \begin{cases} \check{\mathbf{e}}_i, & \text{para o nó} = m \\ 0, & \text{para o nó} \neq m \end{cases} \quad (5.7)$$

e ϵ é um parâmetro algorítmico escolhido de modo a aproximar sua versão discreta espacial (tipicamente $\epsilon = h/100$, sendo h o tamanho de malha). O sistema (5.6) é constituído de $6M$ equações diferenciais. A discretização temporal (totalmente implícita) é dada a seguir.

5.2.3. Problema discreto no espaço e no tempo

Para $\underline{\mathbf{X}}^n$ dado, computar $\underline{\mathbf{X}}^{n+1}$ e $\underline{\mathbf{U}}^{n+1}$, satisfazendo, para todo i e m :

$$\begin{cases} \frac{\underline{\mathbf{X}}^{n+1} - \underline{\mathbf{X}}^n}{\Delta t} - \underline{\mathbf{U}}^{n+1} = 0 \\ \frac{\mathcal{E}_e(\underline{\mathbf{Y}}, \underline{\mathbf{X}}^{n+1} + \epsilon \underline{\mathbf{D}}_{(i,m)}) - \mathcal{E}_e(\underline{\mathbf{Y}}, \underline{\mathbf{X}}^{n+1})}{\epsilon} + \sum_{l=1}^M A_{ml} \frac{(\underline{\mathbf{U}}^{n+1} - \underline{\mathbf{U}}^n)_{(l)i}}{\Delta t} = 0 \end{cases}, \quad (5.8)$$

em que agora $\underline{\mathbf{Y}}$ denota a configuração de referência. O sistema não-linear resultante é resolvido monoliticamente pelo método de Newton-Raphson com uma aproximação de diferenças finitas para a matriz jacobiana.

Da ideia de James C. Maxwell de que *a viscosidade é uma elasticidade evanescente*, a escolha $\underline{\mathbf{Y}} = \underline{\mathbf{X}}^{n+1} - \tau \underline{\mathbf{U}}^{n+1}$ acaba por aproximar um comportamento viscoso se τ é um passo de tempo virtual suficientemente pequeno⁵ (Tasso & Buscaglia, 2013). Nesse caso, a energia elástica de Γ corresponde a um material de módulo de cisalhamento $G = \mu/\tau$, sendo μ a viscosidade superficial. Em todos os experimentos numéricos aqui reportados $\tau = 0.01 \Delta t$.

Quanto ao contorno γ , sua energia flexural já está computada em $\mathcal{E}_e$. Sua inextensibilidade, no entanto, é imposta por penalização, a saber, associando-se à γ a energia elástica hookeana

$$\mathcal{E}_\gamma \doteq \frac{1}{2} \sum_{k \in \gamma_h} k_\gamma \|\mathbf{X}_{(k)} - \mathbf{X}_{(k)}^0\|_2^2, \quad (5.9)$$

em que $\mathbf{X}_{(k)}^0$ é o vetor posição do nó k da malha na *configuração inicial* e o somatório em $k \in \gamma_h$ indica que somente os nós da fronteira discreta γ_h participam. Observamos que embora essa restrição também possa ser imposta via multiplicador de Lagrange, optamos por (5.9) pois assim também podemos calcular a energia elástica do contorno, ou seja, o próprio valor de $\mathcal{E}_\gamma$.

A equação (5.2) é tratada numericamente da seguinte forma: κ e K são calculados segundo Meyer *et al.* (2002). Dado que σ é imposto a valor constante, o termo que envolve a tensão superficial é integrado diretamente. Há ainda o tratamento numérico de $\varkappa$, a curvatura do contorno γ , a qual não é possível ser calculada segundo a proposta de (Meyer *et al.*, 2002), justamente por este se basear em uma vizinhança nó-elemento que deve circundar os nós de interesse do cômputo. Assim sendo, outras estratégias foram buscadas. A

⁵Por exemplo, observamos que é possível tomar $\tau = \Delta t$ e então $\underline{\mathbf{X}}^t - \tau \underline{\mathbf{U}}^t \approx \underline{\mathbf{X}}^{t-\Delta t}$, o que corresponde a considerar a configuração previamente computada como a configuração de referência.

teoria básica da geometria diferencial de curvas discretas que nos guiou é dada por Carroll *et al.* (2014) e Sullivan (2008). Quanto ao tratamento numérico, o que finalmente utilizamos para o cômputo da curvatura do contorno é uma simples extrapolação baseada na curvatura média dos nós interiores, por sua vez calculada segundo Meyer *et al.* (2002). Mais especificamente, o valor da curvatura de em cada nó p da borda é dado pela média aritmética da curvatura média dos nós primeiros vizinhos de p e interiores à γ .

Antes de discutir os experimentos numéricos, faz-se útil introduzir os parâmetros adimensionais associados à σ , c_{CH} e à c_{G} . Se γ tem comprimento fixo $2\pi R$ são eles:

$$\nu = \frac{\sigma R^3}{\alpha}, \quad (5.10)$$

$$\eta = \frac{c_{\text{CH}} R}{\alpha}, \quad (5.11)$$

$$\bar{\eta} = \frac{c_{\text{G}} R}{\alpha}. \quad (5.12)$$

5.3. Modelo de Euler-Plateau

Se além da inextensibilidade de γ_h há apenas tensão superficial e energia flexural, *i.e.*, tomando-se (5.2) com $c_{\text{CH}} = c_{\text{G}} = 0$, resulta a seguinte energia (já na forma adimensional)

$$\tilde{\mathcal{E}}_{\text{EP}}(\Gamma) = \nu \int_{\tilde{\Gamma}} d\tilde{\Gamma} + \frac{1}{2} \int_{\tilde{\gamma}} \tilde{\kappa}^2 d\tilde{\gamma}, \quad (5.13)$$

o então denominado modelo de *Euler-Plateau*. Em (5.13), $d\tilde{\Gamma} = d\Gamma/R^2$ e $\tilde{\kappa} = R\kappa$. O modelo de Euler-Plateau é essencialmente um modelo elástico apenas para o contorno no qual a superfície Γ é munida somente de tensão superficial. Concretamente, esse é o caso de uma película de sabão em um *loop* flexível de arame (Chen & Fried, 2014; Lovett, 1994).

Novamente, nesse tipo de modelo os equilíbrios estáticos estáveis são o primeiro aspecto relevante. Mais fundamentalmente, e antes mesmo da determinação de várias possíveis geometrias estáveis, há a questão de se *uma dada geometria inicial* é ou não *instável*. À isso é dedicada a valiosa análise de estabilidade linear de Chen & Fried (2014) para uma forma inicial circular (plana, portanto). Em suma, tomando a tensão superficial adimensional ν como parâmetro de controle, os autores reportam que:

- I. Uma configuração plana circular é estável se e só se $\nu < 3$;
- II. Em $\nu = 3$ há bifurcação para formas não-circulares, mas ainda planas;
- III. Se $3 < \nu < 15$, existe uma *única configuração plana de energia mínima* (não necessariamente estável, no entanto);
- IV. Em $\nu = 6$, há bifurcação *instável* do tipo sela;
- V. Não são conhecidos valores de ν para os quais configurações do tipo sela são estáveis.

Com vistas à verificação da implementação numérica, faz-se útil a afirmação I – que de fato é por nós corroborada numericamente no que se segue. Dela, ainda, e pelas afirmações II e III, somos levados a determinar as geometrias estáveis de energia mínima para as quais $\nu > 3$. Como veremos a seguir, tais configurações vão do formato de uma elipse à formas bicôncavas *planas* à medida que a tensão superficial cresce). Por fim, a solução numérica por elementos finitos do modelo de Euler-Plateau nos permitiria responder a afirmação V por tentativa e erro, encontrando-se um contra-exemplo (não o encontramos, de fato). .

5.3.1. Experimentos numéricos

Em acordo com o que preconiza a análise de estabilidade *linear* de Chen & Fried (2014), as perturbações nas direções radial e axial foram tomadas respectivamente como

$$\nu(r, \theta) = r^2 \sin(2\theta) \quad (5.14)$$

e

$$w(r, \theta) = r^2 \sin(2\theta), \quad (5.15)$$

cada qual com um fator de escala (respectivamente, c_ν e c_w). De fato, ν como em (5.14) é uma escolha nossa. Assim como deduzem Chen & Fried (2014), a perturbação radial não possui uma forma explícita fechada; o que a define é apenas $\rho(r) \sin(2\theta)$, em que ρ é qualquer função diferenciável que cumpre a restrição $\rho(0) = 0$.

Mais detalhadamente, uma malha de triângulos de um círculo unitário foi levemente perturbada segundo as funções ν e w dadas em (5.14) e (5.15) multiplicando-as por um único fator de escala $c_\nu = c_w = 0.02$. A diferença relativa do comprimento do contorno da forma perturbada com respeito ao comprimento da malha original resultou ser menor do que 0.1%.

A preservação do comprimento do contorno ℓ_γ é feita por penalização, que então requer um estudo paramétrico que indique um valor mínimo para a constante elástica do contorno k_γ . Mais precisamente, é preciso saber quão grande k_γ deve ser em relação à σ para que a alteração do comprimento do contorno seja desprezível. Como se pode ver na Figura 5.5, $k_\gamma/\sigma \approx 1000$ é um valor mínimo bastante razoável para o qual ℓ_γ praticamente não se altera.

Figura 5.5: Inextensibilidade de γ por penalização de energia elástica hookeana. Pondo-se $k_\gamma = 10^4 \sigma$ o erro relativo com respeito ao valor *inicial* de ℓ_γ é $8.7120\text{E}-05$ e então já pode ser considerado suficientemente pequeno.

Para o problema de Euler-Plateau, se a tensão superficial é relativamente grande ($\nu > 3.0$), a forma circular deixa de ser uma configuração de equilíbrio energeticamente favorável e então ocorrem transições (Chen & Fried, 2014). De fato, obtivemos uma transição para uma forma elíptica em $\nu \approx 3.0$, conforme ilustrado na Figura 5.6 (*instabilidade* exibida para dois tempos distintos). Quanto à evidências experimentais, ao menos sob certas condições de ambiente, Skar-Gislinge *et al.* (2010) afirmam que nanodiscos de partículas de HDL de fato podem tomar uma forma de elipse (Figura 5.7).

Figura 5.6: Instabilidade circular na solução do problema de Euler-Plateau (sem viscosidade). Contorno da forma elíptica na qual $\nu = 3.1$ em $t = 0.05$ e $t = 0.10$. Em $\nu \approx 3.0$ a solução trivial circular deixa de estável e transiciona para uma forma não-circular, mas ainda plana.

Figura 5.7: Possíveis formatos do HDL discoidal. Figura extraída de Skar-Gislinge *et al.* (2010).

Na Figura 5.6 exibimos que a forma circular plana é instável para $\nu > 3.0$ como solução do problema de Euler-Plateau, mas esse também é o caso se as curvaturas média e gaussiana de Γ também integram o modelo – equação (5.2). O maior tempo exibido ($t = 0.10$) para tensão superficial $\nu = 3.1$ não se refere ao valor de equilíbrio estático, pelo que então surge a questão de determiná-lo. À isso se destinam os resultados contidos na Figura 5.8, na qual se pode ver que as configurações estáveis são algo como elipses que se achatam à medida que ν aumenta, até por fim se tornarem côncavas.

Figura 5.8: Dependência de forma de equilíbrio com respeito ao valor da tensão superficial (modelo de Euler-Plateau, sem viscosidade). Contorno da forma elíptica na qual $\nu = 3.1$ em $t = 0.05$ e $t = 0.10$. Em $\nu \approx 3.0$ a solução trivial circular deixa de estável e transiciona para uma forma não-circular, mas ainda plana.

No problema de Euler-Plateau, e ainda sobre a Figura 5.8, naturalmente há ainda a pergunta do que acontece se a tensão superficial ν for ainda maior do que 3.9. Antes de tratar dessa questão (e já almejando grandes deformações na malha) é precisamos discutir como o movimento nodal lagrangiano pode dinamicamente inviabilizar a malha.

Ao simularmos o problema de Euler-Plateau os únicos nós de malha que podem se mover são aqueles pertencentes aos triângulos do contorno (dado que a superfície Γ experimenta forças de caráter estritamente *normal*). Como consequência, a malha pode se deteriorar por causa de mudanças geométricas relativamente grandes – até o colapso total dos triângulos da borda. Como verdadeiramente se pode ver no contorno da malhas exibida na Figura 5.9 (a), esse é o caso quando a forma circular não é estável ($\nu > 3.0$). Ao tratar a membrana como viscosa, porém, o movimento tangencial de *todos* os nós é viabilizado, minimizando o problema de colapso da malha como exibido na Figura 5.9 (b). Embora possa ser pensada como sendo verdadeiramente física, aqui, para nós, a viscosidade é utilizada mais como um artifício numérico que permite simular um maior espectro de casos, principalmente aqueles em que há deformação severa (exatamente por não permitir que a malha tanto se deteriore).

Figura 5.9: Regularização de malha por viscosidade superficial. O valor da tensão superficial é $\nu = 3.5$ em ambos os casos. O contorno das formas de equilíbrio sem viscosidade (a) e com viscosidade (b) são coincidentes. Com viscosidade, o colapso dos triângulos da borda pode ser evitado mantendo-se a mesma geometria de equilíbrio (mas, evidentemente, com outra dinâmica de evolução).

Uma vez utilizando-se da viscosidade como um artifício regularizador de malha, voltemos à questão do que ocorre para tensões superficiais ainda maiores do que as que são apresentadas na Figura 5.8. Pois bem, em $\nu \approx 4.0$ há transições para *formas não-planas do tipo sela*. Todas essas configurações não-planas, no entanto, se mostram instáveis em todos

os casos simulados. Na Figura 5.10 exibimos uma instabilidade não-plana quando $\nu = 4.0$. A geometria inicial é a solução de equilíbrio para $\nu = 3.9$, uma configuração ainda plana. Na Figura 5.10 (lado direito, acima) há um transiente não-plano do tipo sela, mas ao final a solução de equilíbrio acaba por ser plana, mas contorcida, Figura 5.10 (lado inferior direito).

Figura 5.10: Instabilidade aplanar no modelo de Euler-Plateau (com viscosidade). Formas superficiais instantâneas exibidas a tempo crescente da esquerda para a direita e de cima para baixo. Há um rápido transiente não-plano em que há torção, mas na solução de equilíbrio o formato superficial volta a ser plano.

A contorção exibida na Figura 5.10 se deve ao fato de que apenas o contorno possui um termo energético de flexão associado. Em outras palavras, como a superfície Γ possui somente tensão superficial, sua flexão não custa energia. Por isso, no modelo de Euler-Plateau é “energeticamente permitido” que Γ se contorça. No modelo de Euler-Canham-Helfrich, no entanto, há custo energético associado à flexão. Por essa razão, configurações contorcidas são energeticamente desfavoráveis – ou até mesmo proibidas – nos casos em que a flexão de Γ tem custo não-nulo. Exatamente disso nos ocupamos a seguir.

5.4. Modelo de Euler-Canham-Helfrich

O modelo de Euler-Canham-Helfrich já foi introduzido na equação (5.2). Sua forma adimensional (essa sim pela primeira vez apresentada) é

$$\tilde{\mathcal{E}}_{\text{ECH}}(\Gamma) = \frac{\eta}{2} \int_{\tilde{\Gamma}} \tilde{\kappa}^2 d\tilde{\Gamma} + \bar{\eta} \int_{\Gamma} \tilde{K} d\tilde{\Gamma} + \nu \int_{\tilde{\Gamma}} d\tilde{\Gamma} + \frac{1}{2} \int_{\tilde{\gamma}} \tilde{\varkappa}^2 d\tilde{\gamma}, \quad (5.16)$$

em que $\tilde{K} = R^2 K$, $\tilde{\kappa} = R\kappa$, e, como antes, $d\tilde{\Gamma} = d\Gamma/R^2$ e $\tilde{\varkappa} = R\kappa$.

No modelo de Euler-Canham-Helfrich, justamente devido à adição das curvaturas média e gaussiana de Γ , as formas de equilíbrio passam a depender, além de ν , também de η e de $\bar{\eta}$, adimensionais esses definidos em (5.10), (5.11) e (5.12). Nesse caso, o até então diagrama de estabilidade unidimensional em ν passa a ser bidimensional (fixado η ou $\bar{\eta}$) ou então tridimensional se no espaço paramétrico completo.

A análise de estabilidade *linear* para o modelo de Euler-Canham-Helfrich é atribuído a Maleki & Fried (2013). Segundo a clara dedução dos autores, no modelo de Euler-Canham-Helfrich cada modo de perturbação na direção axial depende dos parâmetros materiais η , $\bar{\eta}$ e ν . Assim ela acaba tendo uma expressão não tão simples, mas que possui uma forma explícita em termos da função de Bessel modificada de primeira espécie. A saber,

$$w_n(r, \theta) = \omega_n(r) \Theta_n(\theta), \quad (5.17)$$

em que

$$\omega_n(r) = I_n(\zeta r) + \lambda_n r^n, \quad (5.18)$$

$$\Theta_n(\theta) = a_n \cos(n\theta) + b_n \sin(n\theta), \quad (5.19)$$

com

$$\lambda_n \doteq \frac{\frac{\eta}{4} \zeta^2 I_n''(\zeta) + (\frac{\eta}{4} + \bar{\eta})(\zeta I_n'(\zeta) - n^2 I_n(\zeta))}{n(n-1)\bar{\eta}} \quad (5.20)$$

$$\zeta \doteq 2\sqrt{\frac{\nu}{\eta}}, \quad (5.21)$$

sendo $I_n(\cdot)$ a função de Bessel modificada do primeiro tipo de ordem n (relativa ao modo de perturbação) e I' e I'' suas derivadas. É importante ressaltar que devido ao numerador do segundo membro de (5.20), a perturbação transversal $w_n(r, \theta)$ não está definida para $\bar{\eta} = 0$.

A perturbação plana é dada por (5.14), ora explicitada já para o segundo modo de perturbação radial, situação esta a qual se referem todos os nossos resultados numéricos.

Para as perturbações transversa e plana, os resultados de Maleki & Fried (2013) estão dispostos na Figura 5.11 (para $\eta = 1$ e modo de perturbação transversa $n = 2$). No problema de Euler-Plateau é proibida a transição de uma forma circular plana diretamente para uma forma não-plana Maleki & Fried (2013). Isso não necessariamente ocorre no problema Euler-Canham-Helfrich, como se pode ver no diagrama da Figura 5.11: da região amarela à verde perturbações transversas instabilizam a forma circular e esta transiciona diretamente para uma configuração do tipo sela.

Ainda, a zona de transição em $\nu = 3$ presente na Figura 5.11 delimita a tensão superficial crítica aquém da qual o disco unitário permanece estável se perturbado na direção radial. Tal valor limiar independe dos parâmetros η e $\bar{\eta}$ pois estes relacionam-se às curvaturas κ e K , as quais permanecem nulas se o disco unitário é perturbado apenas radialmente. Por isso o valor para essa transição é idêntica no modelo de Euler-Plateau.

Figura 5.11: Diagrama de estabilidade linear do modelo de Euler-Canham-Helfrich para $\eta = 1$ e segundo modo de perturbação ($n = 2$). Regiões: círculo estável, círculo instável com respeito à perturbações transversas, círculo instável com respeito à perturbações planas e instável tanto para perturbações transversas como para planas. Fonte: cortesia de Eliot Fried (Maleki & Fried, 2013).

Do ponto de vista numérico, nosso objetivo imediato foi exatamente a obtenção da zona de transição das formas planas às não-planas (da região amarela à amarela e verde e também da região cinza à azul, Figura 5.11). Também verificamos numericamente a zona de transição em $\nu = 3$, sobre a estabilidade do disco unitário com respeito à perturbações planas. Para os resultados numéricos que seguem, a perturbação transversa foi normalizada a valor máximo $z = 0.05$ para que os resultados pudessem ser comparados de maneira uniforme (dado que a própria perturbação transversa é dependente dos parâmetros materiais ν , η e $\bar{\eta}$). A perturbação radial também foi normalizada a esse valor máximo.

5.4.1. Experimentos numéricos

Antes de abordar o modelo de Euler-Canham-Helfrich completo, o passo seguinte ao modelo de Euler-Plateau é considerar $c_{\text{CH}} \neq 0$ (i.e., $\eta \neq 0$) e $c_{\text{G}} = 0$ (i.e., $\bar{\eta} \neq 0$). Ocorre que como o termo de energia da curvatura média é sempre positivo, se uma forma é de mínima energia no problema de Euler-Plateau, então ela é também solução de mínima energia do problema de Euler-Canham-Helfrich. Em outras palavras, mínimos de energia de formas planas são indiferentes à curvatura. Evidentemente, para superfícies curvas, a própria dinâmica de evolução é diferente, mas isso não impede que o mesmo mínimo local seja atingido em ambos os casos.

Na Figura 5.12, com $\bar{\eta} = 0$ vemos que a transição para uma forma não-plana continua a se dar em $\nu \approx 4.0$ também se $\eta \neq 0$. Assim como ilustrado na Figura 5.10 para o problema de Euler-Plateau, para além da transição não-plana sempre houve tendência de torção de 180° também se $\eta \neq 0$ (e $\bar{\eta} = 0$). O fato de as curvaturas serem extremamente localizadas, como exibido na Figura 5.13, impossibilita que o método numérico seja capaz de computá-la adequadamente. Sobretudo a curvatura gaussiana, K , localiza-se em um único nó. Nesse casos, verificamos que o método de Newton-Raphson diverge e não houve como prosseguir com as simulações. Seja como for, até onde foi possível simular (e.g., como no resultado da Figura 5.13) nenhuma forma não-plana revelou-se estável a partir da condição inicial circular.

Figura 5.12: Zona de transição não-planar – problema de Euler-Canham-Helfrich a $\bar{\eta} = 0$. Valor de $\nu = \sigma R^3 / \alpha$ a partir do qual a forma plana não-circular se torna instável (como, por exemplo, aquela exibida na Figura 5.9), em função de $\eta = c_{\text{CH}} R / \alpha$. Para cada valor de ν , a geometria inicial é a solução problema de Euler-Plateau para ν diminuído em 0.1.

Figura 5.13: Curvaturas extremamente localizadas na solução do problema de Euler-Canham-Helfrich com $\eta = 2.6$ e $\bar{\eta} = 0$. A curvatura gaussiana é extremamente localizada em um único nó, dificultando a solução numérica.

Uma vez adicionada a curvatura média ao problema, incluímos também a curvatura gaussiana para a análise completa do modelo de Euler-Canham-Helfrich. Nosso objetivo foi sucinto: investigar as instabilidades do disco circular unitário com respeito às perturbações *transversa* e *plana*.

Na Figura 5.14 exibimos uma comparação entre o nosso resultado numérico e a análise de estabilidade linear de Maleki & Fried (2013) da Figura 5.11. Embora no mesmo gráfico, cada perturbação (transversa ou plana) foi investigada separadamente. As curvas vermelhas são seus resultados analíticos enquanto que cada ponto contido no gráfico corresponde a uma simulação numérica de um par $(\bar{\eta}, \nu)$. Quanto à comparação, os resultados numéricos apresentados para a transição não-planar são os melhores e mais abrangentes dentre várias simulações que fizemos, dado que houve sensibilidade à malha. Os valores de transição para a forma não-planar para $\bar{\eta} \approx 0$ são omitidos pois $\bar{\eta} = 0$ gera uma perturbação transversa próxima de ser singular. Como esperado, a zona de transição do disco para a forma não-circular plana resultou em ótima concordância com Maleki & Fried (2013) já que nesse caso as curvaturas média e gaussiana não desempenham qualquer papel dinâmico. Para uma primeira investigação à parte do âmbito principal da tese, as simulações cumprem seu papel.

Figura 5.14: Diagrama de estabilidade de um disco circular para perturbações transversa e plana para o modelo de Euler-Canham-Helfrich, $\eta = 1$ e ambas perturbações de modo igual a 2.

5.5. Observações finais

Uma formulação variacional discreta de elementos finitos foi introduzida para simular a mecânica do HDL discoidal, o qual consiste em uma estrutura em bicamada lipídica contornada por uma apolipoproteína. Para modelagem, além da bicamada, justamente a proteína do contorno também precisa ter sua física modelada (em suma, isso é feito tratando-a como uma barra elástica inextensível). Mais do que isso, ela tem que ser tratada numericamente. Com a adição do termo de energia flexural presente no contorno, a derivada da energia de forma torna-se numericamente inconveniente e portanto uma abordagem diferente da proposta do Capítulo 4 foi adotada. Trata-se essencialmente da estratégia de Tasso & Buscaglia (2013) com devidos adendos e extensões para os termos do contorno.

A questão da configuração estrutural das lipoproteínas se dá na mesma perspectiva que extensivamente discutimos para os lipossomas. De maior interesse, há a estrutura adotada pelo HDL discoidal, só recentemente revelada como provalmente tendo formato de elipse. De fato, assim como deduzem Maleki & Fried (2013) e discutem Skar-Gislinge *et al.* (2010) assim também obtivemos em nossas simulações.

Antes de tratar de um modelo completo para o HDL discoidal, abordarmos o modelo de Euler-Plateau, que exceto pela tensão superficial trata-se essencialmente de um modelo

apenas para o contorno apolipoproteico. Nesse caso, apresentamos o primeiro cálculo de formas não-circulares planas (elípticas). Quando a tensão superficial é ainda maior, reportamos também transições para formas não-planas (que se contorcem mas posteriormente voltam a ser planas). Para tanto, o movimento nodal tangencial foi viabilizado por meio de uma viscosidade superficial que evita o colapso de malha (caso contrário, apenas os nós do contorno se movimentam). Além da energia flexural, o contorno foi dotado de uma energia elástica hookeana de modo a mantê-lo inextensível por meio de penalização. O estudo paramétrico necessário à essa abordagem também foi apresentado.

O tratamento numérico completo da mecânica do HDL discoidal se deu na solução numérica do problema de Euler-Canham-Helfrich. Em particular, foi corroborada a zona de transição circular à não-circular plana quando por ocasião de perturbação radial. A transição direta das formas circulares à formas não-planas por perturbação transversa também foi obtida numericamente, embora com uma precisão não tão satisfatória que carece de uma investigação mais detalhada.

A seguir apresentamos uma breve síntese da tese e as considerações finais.

Le savant doit ordonner ; on fait la science avec des faits comme une maison avec des pierres ; mais une accumulation de faits n'est pas plus une science qu'un tas de pierres n'est une maison.

J. H. Poincaré

Capítulo

6

Considerações finais

As bicamadas lipídicas são o material básico das interfaces das organelas celulares. Sob o ponto de vista da mecânica do contínuo, trata-se de um material tangencialmente viscoso e que possui rigidez à flexão na direção normal. À modelagem, uma interface lipídica é um fluido superficial newtoniano governado pela lei de Boussinesq-Scriven cuja flexão ocorre às custas da energia de Canham-Helfrich. Comporta-se como uma superfície inextensível, pelo que por vezes também é descrita como um fluido superficial incompressível com uma pressão ou tensão superficial associada. Além então dessa restrição de área superficial, as bicamadas lipídicas fechadas possuem volume interior fixo cujo valor manifestado é uma consequência da pressão osmótica manter-se nula.

Sem dúvida, a mecânica das interfaces lipídicas vive atualmente sua fase mais vigorosa e produtiva. É fato que o conhecimento produzido na área tem se acumulado veementemente, mas para fazer ciência é preciso mais do que isso. É preciso compilar resultados segregados de modo a torná-los primeiros princípios. Por outro lado, não menos importante são as investigações científicas diretamente relacionadas às aplicações. Seja como for, contribuindo na pesquisa básica ou aplicada, a análise numérica atual está começando projetar-se como uma poderosa ferramenta para o entendimento da física das interfaces lipídicas.

Embora fortemente motivada pela mecânica celular, a presente tese é um tratamento numérico da mecânica das interfaces lipídicas em âmbito mais básico do que aplicado. Nesse sentido, não compreende toda a complexidade de uma célula viva, senão que diz respeito ao principal modelo experimental da membrana plasmática: o lipossoma. Por outro lado, dado que atualmente o uso das estruturas lipossomais também são realidade em aplicações (*e.g.*, como transportadores de fármacos) nosso método de elementos finitos presta-se ao estudo mecânico de um ente físico estrutural real: a bicamada lipídica lipossomal.

O método de elementos finitos proposto para simular a mecânica de interfaces lipídi-

cas tem como incógnitas a velocidade, a curvatura e a pressão superficiais, todas interpoladas com elementos lineares contínuos. Devido à mesma ordem de interpolação da velocidade e da pressão, a equação de inextensibilidade é estabilizada via projeção do gradiente de pressão. Um outro termo estabilizador é utilizado na forma fraca da identidade de Laplace-Beltrami para diminuir a restrição de passo de tempo e para de fato permitir que a curvatura também seja calculada com elementos lineares. Embora essa última seja uma estabilização utilizada por nós e por outros autores, uma análise numérica mais formal à seu respeito ainda está por ser estabelecida.

Quanto à discretização temporal, o método proposto é semi-implícito no sentido de que todas as incógnitas ao tempo $n + 1$ são definidas na superfície discreta ao tempo n . Observamos uma estabilidade temporal que impõe uma restrição de passo de tempo que escala como o quadrado do tamanho do passo de malha. A esse respeito, aliás, fornecemos uma regra empírica de uso prático. Em suma, em quantidades adimensionais, basta escolher o passo de tempo como a fração de um décimo do quadrado do menor passo de malha. Como exploramos, seu emprego é imprescindível ao utilizar-se de processos de remalhagem em situações de forças extremamente localizadas (como nos *tethers*) ou ainda quando há mudanças geométricas severas ao longo da dinâmica membranal (como em processos osmóticos de murchamento).

Extensivos experimentos numéricos de relaxação membranal foram reportados e comparados com soluções quasi-analíticas na configuração membranal estática de equilíbrio estável (mínimo local de energia de curvatura), inclusive para uma membrana com topologia não-trivial, um toro (*i.e.*, para uma superfície orientável fechada com gênero distinto de zero). A ordem de convergência das variáveis de interesse foi reportada e analisada em equilíbrio estático. Já para o transiente da dinâmica de relaxação foi verificada a consistência dos resultados para malhas com diferentes níveis de refinamento (dada a ausência de soluções analíticas). Ainda, ilustramos a potencialidade do método em outras aplicações: osmose, força externas tangenciais e um exemplo hipotético de membrana de área variável (hipotético para a situação particularmente exemplificada, mas que de fato ocorre quando são adicionados lipídios à membrana). Uma abordagem mais extensiva desse último tópico não foi possível por não contarmos com um algoritmo de auto-colisão membranal, mas nada impede sua implementação futura.

Como algo à parte, propomos também uma modelagem numérica de forças extremamente localizadas que mimetizam a ação de pinças ópticas. Ela introduz a possibilidade interação virtual com pequenas parcelas membranais e possibilita investigar a resposta membranal à forças externas aplicadas (o que já é realidade na física experimental). Reportamos e discutimos sua habilidade frente à predição do equilíbrio dinâmico de compridas e finas elongações cilíndricas (*tethers*) que surgem quando uma pequena parcela membranal é pinçada. Em comparação com soluções analíticas para o caso cilíndrico ideal, o pinçamento numérico se mostrou robusto como ferramenta ao prever, em boa concordância, a variação

temporal do raio do *tether* quando há mudanças repentinas no valor imposto da força de pinçamento. A dependência do corpo membranal também foi discutida frente à velocidades fixas de pinçamento revelando um valor mínimo desta quantidade para que um *tether* surja em primeira instância. Ainda, um teste no qual seis pinças numéricas agem simultaneamente ilustra a potencialidade do método.

Como uma continuação natural, também modelamos numericamente a mecânica de interfaces lipídicas com borda; em particular, como aplicação para o estudo da estrutura do HDL discoidal. Devido à presença do tratamento numérico da flexão do contorno, uma abordagem numérica completamente diferente da anterior foi utilizada. Para o problema de Euler-Plateau (contorno elástico com tensão superficial) foi obtida uma família de formas planas não-circulares – que para tensões superficiais ainda maiores se instabilizam em forma de sela mas que ao final contorcem-se e voltam a ser planas. Para o problema de Euler-Canham-Helfrich obtivemos as zonas de transição do disco unitário tanto para formas planas não-circulares (perturbação radial) como para formas não-planas (perturbação axial).

Quanto às perspectivas futuras, há intenção imediata de acoplar o método proposto no Capítulo 4 à simulação numérica de um fluido ambiente. Isso permitirá representá-lo de modo mais completo do que apenas a sua atual representação como pressão interior/exterior. Do ponto de vista numérico, outras potenciais investigações envolveriam testes com elementos de maior ordem para se calcular a velocidade e a curvatura (inclusive com o elemento de Zienkiewicz), estudos detalhados sobre os termos estabilizadores presentes nas equações de inextensibilidade e de Laplace-Beltrami e a imposição aproximada da restrição de inextensibilidade diretamente na equação de momento tomando-se $\lambda \gg \mu$. Outras possíveis aplicações seriam a incorporação de uma curvatura espontânea à energia de Canham-Helfrich e a incorporação de fricção entre as duas camadas que integram a bicamada lipídica.

Por enquanto, e ainda que somente no que diz respeito à mecânica, há um longo caminho a ser desbravado até o entendimento dos fenômenos físicos que regem os processos celulares. Há de serem consideradas outros importantes componentes estruturais: citoesqueleto, canais iônicos, proteínas transmembranares, etc. O primeiro passo, porém, foi dado: a construção de um esquema numérico variacional capaz de simular a intrigante dinâmica das membranas celulares.

Apêndice

A. Cálculo em superfícies

Na matemática do escoamento de superfícies viscosas surgem operadores diferenciais superficiais. Essa seção é devotada a fazer um breve recorte da geometria diferencial¹. Nosso objetivo é o cômputo de derivadas superficiais em termos das derivadas parciais usuais. Para tanto, utilizamos o conceito de extensão normal. Quanto a notação tensorial, salvo menção contrária, adotaremos a convenção da soma de Einstein: omitimos o símbolo de somatório quando aparecem exatamente dois índices tensoriais iguais.

Seja Γ uma superfície de classe C^2 . Supomos tal regularidade para que a função distância orientada – a ser introduzida posteriormente – também seja de classe C^2 em uma vizinhança de Γ (Rangarajan & Lew, 2012). Com efeito, $\tilde{\mathbf{n}}(\mathbf{x} \in \Gamma)$, o versor normal (exterior) a ela está bem definido, pelo que existe um $\delta > 0$ tal que $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta$,

$$\mathcal{D}_\delta = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \mid \mathbf{x} = \mathbf{z} + \eta \tilde{\mathbf{n}}(\mathbf{z}), \mathbf{z} \in \Gamma, |\eta| < \delta\}, \quad (1)$$

a correspondência $\mathbf{x} \leftrightarrow (\mathbf{z}, \eta)$ é uma a uma. Assim sendo, podemos definir $\mathbf{z} = \Pi_\Gamma(\mathbf{x})$ como a projeção normal de $\mathbf{x}$ em Γ . Uma vez definido $\mathcal{D}_\delta$, diremos agora algumas palavras sobre extensão normal de campos, o que nos permitirá definir operadores diferenciais superficiais sem a utilização de derivadas covariantes.

Definição A.1. *Sejam f e $\mathbf{v}$ campos arbitrários (escalar e vetorial, respectivamente) definidos em Γ , cujas extensões normais são definidas como*

$$\hat{f}(\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta) \doteq f(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) \in \Gamma), \quad (2)$$

$$\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta) \doteq \mathbf{v}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) \in \Gamma). \quad (3)$$

Assim, a *extensão normal* $\hat{\mathbf{v}}$ é obtida efetuando-se o transporte paralelo de $\mathbf{v}$ do ponto $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$ para o ponto $\mathbf{x}$, o que equivale a transladar o vetor $\mathbf{v}$ de um ponto $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) \in \Gamma$ para um

¹Embora com outro enfoque, visões mais aprofundadas sobre o assunto são dadas por Delfour & Zolésio (2011) e Grinfeld (2013).

ponto $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta$. Evidentemente, esta mesma ideia intuitiva pode ser aplicada a campos escalares.

Existe uma função distância $\phi : \mathcal{D}_\delta \rightarrow \mathbb{R}$, tal que a superfície de interesse é dada por $\Gamma \doteq \{\mathbf{x} \mid \phi(\mathbf{x}) = 0\}$. Como parte da definição de ϕ , convém exigir que $\|\nabla \phi(\mathbf{x})\| = 1 \ \forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta$, e que $\nabla \phi$ tenha a mesma orientação do versor normal pois, ao fazê-lo, $\nabla \phi(\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta)$ resulta diretamente em $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta)$, a *extensão normal* de $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x} \in \Gamma)$.

Lema A.2. *Seja $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta$ e a função distância orientada $\phi : \mathcal{D}_\delta \rightarrow \mathbb{R}$ dada por*

$$\phi(\mathbf{x}) \doteq (\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})) \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}). \quad (4)$$

Assim sendo,

$$\nabla \phi(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}). \quad (5)$$

Demonstração. Ora, já que $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ é um vetor unitário e $(\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x}))$ é paralelo a $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$, então $\phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})\|$. Momentaneamente, seja $\mathbf{y} \doteq \Pi_\Gamma(\mathbf{x})$, e assim,

$$\phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})\| = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2}, \quad (6)$$

donde

$$\begin{aligned} \nabla \phi(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2}} (x_1 - y_1, x_2 - y_2, x_3 - y_3) = \\ &= \left(\frac{x_1 - y_1}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|}, \frac{x_2 - y_2}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|}, \frac{x_3 - y_3}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|} \right) = \\ &= \frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|} = \frac{\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})}{\|\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})\|} = \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{n}}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x})). \end{aligned} \quad (7)$$

Claramente, além disso, $\|\nabla \phi(\mathbf{x})\| = 1$. ■

Lema A.3. *Para todo $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta$ e $\forall \epsilon$ tal que $\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \in \mathcal{D}_\delta$, $\phi(\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})) = \phi(\mathbf{x}) + \epsilon$.*

Demonstração. Seja $\bar{r}$ o segmento de reta determinado pelos pontos $\mathbf{x}$ e $\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$. Assim, por desenvolvimento finito, $\exists \mathbf{y} \in \bar{r}$ tal que

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})) &= \phi(\mathbf{x}) + \epsilon \nabla \phi(\mathbf{y}) \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \\ &\stackrel{\text{Lema A.2}}{=} \phi(\mathbf{x}) + \epsilon \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{y}) \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \\ &= \phi(\mathbf{x}) + \epsilon. \end{aligned} \quad (8)$$

■

Agora estamos aptos a definir os operadores gradiente e divergência *superficiais*.

Definição A.4. O gradiente superficial $\nabla_\Gamma f$ de uma função escalar $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ é o campo vetorial d -dimensional definido por

$$\nabla_\Gamma f \doteq \nabla \hat{f}. \quad (9)$$

O gradiente superficial $\nabla_\Gamma \mathbf{v}$ de um campo vetorial $\mathbf{v} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^d$ é o tensor de segunda ordem

$$\nabla_\Gamma \mathbf{v} \doteq \nabla \hat{\mathbf{v}}. \quad (10)$$

Definição A.5. A divergência superficial de $\mathbf{v} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^d$ é dada pelo traço de $\nabla_\Gamma \mathbf{v}$,

$$\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{v} \doteq \text{tr}(\nabla_\Gamma \mathbf{v}) = \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}, \quad (11)$$

ou, em notação tensorial, $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{v} = \hat{v}_{i,i}$.

Como enunciado no próximo lema, ressaltamos que o operador ∇_Γ é essencialmente uma derivada *tangencial*.

Lema A.6. Sejam $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ e $\mathbf{v} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^d$ campos quaisquer. Para todo $\mathbf{x} \in \Gamma$ $\nabla_\Gamma f(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = 0$ e $\nabla_\Gamma \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, isto é, $(\nabla_\Gamma \mathbf{v})_{ij} \hat{n}_j = \partial_j \hat{v}_i \hat{n}_j = \hat{v}_{i,j} \hat{n}_j = 0$.

Demonstração. A prova se dá diretamente pela definição,

$$\begin{aligned} \nabla_\Gamma \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) &\doteq \nabla \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{n}}) - \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x})}{\epsilon} = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\overbrace{\mathbf{v}(\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{n}} - \phi(\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}})}^{\in \Gamma} - \mathbf{v}(\mathbf{x})}{\epsilon} \stackrel{\text{Lema A.3}}{=} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(\mathbf{x} + \epsilon \hat{\mathbf{n}} - (\phi(\mathbf{x}) + \epsilon) \hat{\mathbf{n}}) - \mathbf{v}(\mathbf{x})}{\epsilon} = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(\mathbf{x} + \underbrace{\epsilon \hat{\mathbf{n}} - \overbrace{\phi(\mathbf{x})}^{=0, \mathbf{x} \in \Gamma}}_{\epsilon} - \epsilon \hat{\mathbf{n}}) - \mathbf{v}(\mathbf{x})}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \mathbf{v}(\mathbf{x})}{\epsilon} = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (12)$$

Para um campo escalar a demonstração é análoga. ■

Definição A.7. O (tensor) projetor tangencial é $\mathbb{P} \doteq \mathbb{I} - \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}}$. Em notação tensorial, $P_{ij} = \delta_{ij} - \hat{n}_i \hat{n}_j$. Evidentemente, $P_{ij} = P_{ji}$.

Lema A.8. $\mathbb{P} \mathbb{P} = \mathbb{P}$.

Demonstração.

$$(\mathbb{P} \mathbb{P})_{ij} = P_{ik} P_{kj} = (\delta_{ik} - \hat{n}_i \hat{n}_k)(\delta_{kj} - \hat{n}_k \hat{n}_j) =$$

$$\begin{aligned}
 &= \delta_{ik}\delta_{kj} - \delta_{ik}\cancel{\tilde{n}_k}\tilde{n}_j - \delta_{kj}\tilde{n}_i\cancel{\tilde{n}_k} + \tilde{n}_i\cancel{\tilde{n}_k}\tilde{n}_k\cancel{\tilde{n}_j} = \\
 &= \delta_{ij} - \tilde{n}_i\tilde{n}_j - \cancel{\tilde{n}_i\tilde{n}_j} + \cancel{\tilde{n}_i\tilde{n}_j} = \\
 &\doteq (\mathbb{P})_{ij}.
 \end{aligned} \tag{13}$$

■

Lema A.9. $\mathbb{P}(\mathbf{x})$ projeta sobre o plano tangente em $\mathbf{x}$.

Demonstração. Seja $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ arbitrário; sempre é possível decompô-lo de modo único em:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}_\tau(\mathbf{x}) + v_{\hat{n}}(\mathbf{x})\hat{\mathbf{n}}, \tag{14}$$

em que $\mathbf{v}_\tau(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$. Aplicando-se o projetor,

$$\begin{aligned}
 (\mathbb{P} \cdot \mathbf{v})_i &= (\delta_{ij} - \hat{n}_i\hat{n}_j)v_{\tau j} + (\delta_{ij} - \hat{n}_i\hat{n}_j)\hat{n}_j v_{\hat{n}} = \\
 &= v_{\tau i} - \hat{n}_i\hat{n}_j v_{\tau j} + \hat{n}_i v_{\hat{n}} - \hat{n}_i\hat{n}_j\hat{n}_j v_{\hat{n}} = \\
 &= v_{\tau i} - 0 + \cancel{\hat{n}_i v_{\hat{n}}} - \cancel{\hat{n}_i v_{\hat{n}}} \\
 &= v_{\tau i},
 \end{aligned} \tag{15}$$

isto é, $\mathbb{P}\mathbf{v} = \mathbf{v}_\tau$.

■

Lema A.10. Seja $f : \mathcal{D}_\delta \rightarrow \mathbb{R}$. Assim, $\nabla_\Gamma f = \mathbb{P}\nabla f$.

Demonstração. Seja $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta$, então,

$$\hat{f}(\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta) = f(\Pi_\Gamma \mathbf{x} \in \Gamma) = f(\mathbf{x} - \phi(\mathbf{x})\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})). \tag{16}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
 (\nabla_\Gamma f(\Pi_\Gamma \mathbf{x}))_i &= \partial_j f(\Pi_\Gamma \mathbf{x}) \partial_i [x_j - \phi(\mathbf{x})\hat{n}_j(\mathbf{x})] = \\
 &= \partial_j f(\Pi_\Gamma \mathbf{x}) [\delta_{ij} - \hat{n}_i\hat{n}_j] = \\
 &= [\delta_{ij} - \hat{n}_i\hat{n}_j] (\nabla f(\Pi_\Gamma \mathbf{x}))_j = \\
 &= (\mathbb{P}\nabla f(\Pi_\Gamma \mathbf{x}))_i,
 \end{aligned} \tag{17}$$

donde, da igualdade componente a componente, segue o resultado.

■

Definição A.11. O gradiente de um campo vetorial é dado por $(\nabla \mathbf{v})_{ij} \doteq \partial_j v_i$.

Lema A.12. $\nabla_\Gamma \mathbf{v} = \nabla \mathbf{v} \mathbb{P}$.

Demonstração. Seja $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta$, então,

$$\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta) = \mathbf{v}(\Pi_\Gamma \mathbf{x} \in \Gamma) = \mathbf{v}(\mathbf{x} - \phi(\mathbf{x})\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})). \tag{18}$$

Ainda mais,

$$\begin{aligned}
 (\nabla_{\Gamma} \mathbf{v}(\Pi_{\Gamma} \mathbf{x}))_{ij} &= \partial_k v_i(\Pi_{\Gamma} \mathbf{x}) \partial_j [x_k - \phi(\mathbf{x}) \hat{n}_k(\mathbf{x})] = \\
 &= \partial_k v_i(\Pi_{\Gamma} \mathbf{x}) [\delta_{kj} - \hat{n}_k \hat{n}_j] = \\
 &= (\nabla \mathbf{v}(\Pi_{\Gamma} \mathbf{x}))_{ik} [\delta_{kj} - \hat{n}_k \hat{n}_j] = \\
 &= (\nabla \mathbf{v}(\Pi_{\Gamma} \mathbf{x}) \mathbb{P})_{ij},
 \end{aligned} \tag{19}$$

■

Corolário A.13. Do Lema A.8 decorre que $\mathbb{P} \nabla_{\Gamma} f = \nabla_{\Gamma} f$ e, ainda, que $\nabla_{\Gamma} \mathbf{v} \mathbb{P} = \nabla_{\Gamma} \mathbf{v}$.

Demonstração. Do Lema A.10 segue que $\mathbb{P} \nabla_{\Gamma} f = \mathbb{P} \mathbb{P} \nabla f = \mathbb{P} \nabla f = \nabla_{\Gamma} f$. Analogamente, do Lema A.12 decorre $\nabla_{\Gamma} \mathbf{v} \mathbb{P} = \nabla \mathbf{v} \mathbb{P} \mathbb{P} = \nabla \mathbf{v} \mathbb{P} = \nabla_{\Gamma} \mathbf{v}$. ■

Lema A.14. $\mathbb{P} : \nabla \mathbf{v} = \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v}$

Demonstração. Por definição,

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P} : \nabla \mathbf{v} \doteq P_{ij} v_{i,j} &= P_{ij} \hat{v}_{i,j} = (\delta_{ij} - \hat{n}_i \hat{n}_j) \partial_j \hat{v}_i = \partial_i \hat{v}_i - \hat{n}_i \hat{n}_j \partial_j \hat{v}_i = \\
 &= \partial_i \hat{v}_i - \hat{n}_i \hat{n}_j \partial_j \hat{v}_i = \partial_i \hat{v}_i - \hat{n}_i \partial_j \hat{v}_i \hat{n}_j \stackrel{\text{Lema A.6}}{=} \\
 &= \partial_i \hat{v}_i - \hat{n}_i 0 = \partial_i \hat{v}_i \doteq \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} = \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v}.
 \end{aligned} \tag{20}$$

■

Em posse do operador ∇_{Γ} , definimos então o tensor

$$\mathbf{H} \doteq \nabla_{\Gamma} \check{\mathbf{n}}. \tag{21}$$

Este tensor é simétrico já que

$$H_{ij} = (\nabla_{\Gamma} \check{\mathbf{n}})_{ij} = (\nabla \hat{\mathbf{n}})_{ij} = (\nabla(\nabla \phi))_{ij}. \tag{22}$$

Além disso, $\check{\mathbf{n}}$ é um autovetor de $\mathbf{H}$ com autovalor associado 0 pois, pelo Lema A.6, $\nabla_{\Gamma} \check{\mathbf{n}} \cdot \check{\mathbf{n}} = \mathbf{0}$. Este resultado indica que informação geométrica contida em $\mathbf{H}$ é puramente tangencial. Visto como um tensor no plano tangente em $\mathbf{x}$, $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ é a chamada segunda forma fundamental de Γ em $\mathbf{x}$. Já que $d = 3$ e como um dos autovalores de $\mathbf{H}$ é necessariamente 0, denotemos os outros dois restantes por $\kappa_1(\mathbf{x})$ e $\kappa_2(\mathbf{x})$. Assim sendo, a *curvatura média* $\kappa(\mathbf{x})$ é definida como o traço do tensor $\mathbf{H}$,

$$\kappa(\mathbf{x}) \doteq \text{tr}(\mathbf{H}), \tag{23}$$

implicando que $\kappa = \kappa_1 + \kappa_2$ e

$$\kappa \doteq \text{tr}(\mathbf{H}) \doteq H_{ii} = \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} = \nabla_{\Gamma} \cdot \check{\mathbf{n}}. \tag{24}$$

Sendo um invariante de $\mathbf{H}$, a curvatura média não depende da escolha do referencial cartesiano. Também é invariante o produto

$$K = \kappa_1 \kappa_2, \quad (25)$$

o qual é o determinante da parte tangencial de $\mathbf{H}$ e é denominado *curvatura gaussiana*.

Um outro invariante que aparece frequentemente em mecânica do contínuo é a norma de Frobenius de $\mathbf{H}$,

$$\|\mathbf{H}(\mathbf{x})\| \doteq \sqrt{\mathbf{H}(\mathbf{x}) : \mathbf{H}(\mathbf{x})} = \sqrt{H_{ij} H_{ij}}, \quad (26)$$

cujas relação com a curvatura média κ e com a curvatura gaussiana K é dada por

$$\mathbf{H} : \mathbf{H} = \kappa_1^2 + \kappa_2^2 = (\kappa_1 + \kappa_2)^2 - 2\kappa_1 \kappa_2 = \kappa^2 - 2K. \quad (27)$$

No que se segue, denotaremos por χ a função identidade definida por $\chi(\mathbf{x} \in \Gamma) = \mathbf{x} \in \Gamma$ e sua respectiva extensão normal por $\hat{\chi}$, sendo $\hat{\chi}(\mathbf{x} \in \mathcal{D}_\delta) = \Pi_\Gamma \mathbf{x} \in \Gamma$.

Definição A.15. O laplaciano superficial ou operador de Laplace-Beltrami é dado por $\Delta_\Gamma \doteq \nabla_\Gamma \cdot \nabla_\Gamma$.

Lema A.16. Valem as igualdades:

$$\hat{\chi}(\mathbf{x}) = \Pi_\Gamma(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \phi(\mathbf{x})\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}), \quad (28)$$

$$\nabla_\Gamma \chi = \mathbb{P} = \nabla_\Gamma \chi^T, \quad (29)$$

$$\Delta_\Gamma \chi \doteq \nabla_\Gamma \cdot \nabla_\Gamma \chi = -\kappa \hat{\mathbf{n}}. \quad (30)$$

Demonstração. Naturalmente, $\hat{\chi}(\mathbf{x}) \doteq \chi(\Pi_\Gamma(\mathbf{x})) = \Pi_\Gamma(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \phi(\mathbf{x})\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$. Tomando o gradiente superficial da equação (28) e lembrando que $\phi(\mathbf{x} \in \Gamma) = 0$, segue que

$$(\nabla_\Gamma \chi)_{ij} = \hat{\chi}_{i,j} = \partial_j [x_i - \phi \hat{n}_i] = [x_i - \phi \hat{n}_i]_{,j} = \quad (31)$$

$$\begin{aligned} &= \delta_{ij} - \phi_{,j} \hat{n}_i - \hat{n}_{i,j} \stackrel{\text{Lema A.2}}{=} \delta_{ij} - \hat{n}_j \hat{n}_i = \delta_{ji} - \hat{n}_i \hat{n}_j = \\ &= (\nabla_\Gamma \chi)_{ji}. \end{aligned} \quad (32)$$

Por fim, derivando novamente com respeito a x_j ,

$$(\Delta_\Gamma \chi)_i = (\hat{\chi}_{i,j})_{,j} = (\delta_{ij} - \hat{n}_j \hat{n}_i)_{,j} = -\hat{n}_{j,j} \hat{n}_i - \hat{n}_j \hat{n}_{i,j} = -\kappa \hat{\mathbf{n}}, \quad (33)$$

em que, ao final, utilizamo-nos do Lema A.6 e da equação (24). ■

Lema A.17. Vale a igualdade

$$\int_\Gamma (-\Delta_\Gamma \chi \cdot \zeta) d\Gamma = \int_\Gamma \nabla_\Gamma \cdot \zeta d\Gamma \quad \forall \zeta \in Z. \quad (34)$$

Demonstração.

$$\begin{aligned}
 \int_{\Gamma} (-\Delta_{\Gamma} \chi \cdot \zeta) d\Gamma &= \int_{\Gamma} [\nabla_{\Gamma} \chi : \nabla_{\Gamma} \zeta - \nabla_{\Gamma} \cdot (\nabla_{\Gamma} \chi \cdot \zeta)] d\Gamma = \\
 &\stackrel{(29)}{=} \int_{\Gamma} \mathbb{P} : \nabla_{\Gamma} \zeta d\Gamma - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \cdot (\nabla_{\Gamma} \chi \cdot \zeta) d\Gamma = \\
 &\stackrel{\text{Lema A.14}}{=} \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \cdot \zeta d\Gamma - \overbrace{\int_{\partial\Gamma} (\nabla_{\Gamma} \chi \cdot \zeta) \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\partial\Gamma}^{=0, \text{ pois } \partial\Gamma = \emptyset} = \\
 &= \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} \cdot \zeta d\Gamma.
 \end{aligned} \tag{35}$$

■

Lema A.18. *Sejam $\mathbf{S}$ e $\mathbf{A}$ tensores simétrico e antissimétrico, respectivamente. Desse modo, $\mathbf{S} : \mathbf{A} = 0$.*

Demonstração. Por definição, $\mathbf{S} : \mathbf{A} \doteq S_{ij} A_{ij} = S_{ij}(-A_{ji}) = -S_{ij} A_{ji} = -S_{ji} A_{ji}$. Por outro lado, $\mathbf{S} : \mathbf{A} = \mathbf{S}^T : \mathbf{A}^T \doteq S_{ji} A_{ji}$. Assim, $-S_{ji} A_{ji} = S_{ji} A_{ji}$ e então $S_{ji} A_{ji} \equiv 0$. ■

Lema A.19. *Sejam $\mathbf{M}_1$ e $\mathbf{M}_2$ tensores de mesma ordem. Assim sendo, vale a igualdade $(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_1^T) : (\mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_2^T) = 2(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_1^T) : \mathbf{M}_2$.*

Demonstração. Um tensor qualquer, $\mathbf{M}$, digamos, sempre pode ser decomposto pondo

$$\mathbf{M} = \mathbf{A} + \mathbf{S}, \tag{36}$$

em que $\mathbf{S}$ e $\mathbf{A}$ são, respectivamente, simétrico e antissimétrico. Tal composição é única e é dada por

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{M} + \mathbf{M}^T), \tag{37}$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{M} - \mathbf{M}^T). \tag{38}$$

Com efeito, pondo $\mathbf{M}_1 = \mathbf{A}_1 + \mathbf{S}_1$ e $\mathbf{M}_2 = \mathbf{A}_2 + \mathbf{S}_2$, segue que

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_1^T) : (\mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_2^T) &= 2\mathbf{S}_1 : 2\mathbf{S}_2 = 4\mathbf{S}_1 : \mathbf{S}_2 = 4\mathbf{S}_1 : (\mathbf{M}_2 - \mathbf{A}_2) = \\
 &= 4\mathbf{S}_1 : \mathbf{M}_2 - 4\mathbf{S}_1 : \mathbf{A}_2 \stackrel{\text{Lema A.18}}{=} 4\mathbf{S}_1 : \mathbf{M}_2 \\
 &= 2(\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_1^T) : \mathbf{M}_2.
 \end{aligned} \tag{39}$$

■

B. Operador de Boussinesq-Scriven: observações

Seja o operador de Stokes definido pela forma bilinear

$$\mathcal{S}(\mathbf{u}_B, \mathbf{v}) \doteq \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_B : D\mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega} \{2\mu_B D\mathbf{u}_B : D\mathbf{v} + \lambda_B (\nabla \cdot \mathbf{u}_B) (\nabla \cdot \mathbf{v})\} \, d\Omega, \quad (40)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}_B \doteq \lambda_B \nabla \cdot \mathbf{u}_B \mathbb{I} + 2\mu_B D\mathbf{u}_B$, com $D\mathbf{u}_B \doteq 1/2 (\nabla \mathbf{u}_B + \nabla \mathbf{u}_B^T)$.

Sua generalização para superfícies curvas é

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \doteq \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} : D_{\Gamma} \mathbf{v} \, d\Gamma = \int_{\Gamma} \{2\mu D_{\Gamma} \mathbf{u} : D_{\Gamma} \mathbf{v} + \lambda (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v})\} \, d\Gamma, \quad (41)$$

em que

$$\boldsymbol{\sigma} \doteq \lambda \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} \mathbb{P} + 2\mu D_{\Gamma} \mathbf{u}, \quad (42)$$

sendo o operador gradiente superficial simétrico

$$D_{\Gamma} \mathbf{u} \doteq \frac{1}{2} \mathbb{P} (\nabla_{\Gamma} \mathbf{u} + \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}^T) \mathbb{P}. \quad (43)$$

Observação B.1. Alternativamente à sua definição, $D_{\Gamma} \mathbf{v}$ pode ser computado por

$$D_{\Gamma} \mathbf{v} \doteq \frac{1}{2} (\mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} \mathbb{P} + \mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{v}^T \mathbb{P}) = \frac{1}{2} (\mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} + \nabla_{\Gamma} \mathbf{v}^T \mathbb{P}), \quad (44)$$

ou, ainda,

$$D_{\Gamma} \mathbf{v} \doteq \frac{1}{2} (\mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} \mathbb{P} + \mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{v}^T \mathbb{P}) = \frac{1}{2} \mathbb{P} (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \mathbb{P}, \quad (45)$$

já que $\mathbb{P} \mathbb{P} = \mathbb{P}$ e $\nabla_{\Gamma} \mathbf{v} \mathbb{P} = \nabla_{\Gamma} \mathbf{v}$ (ver Lema A.12).

Lema B.2. A forma bilinear $\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ também pode ser expressa por

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} \{\mu \mathbb{P} (\nabla_{\Gamma} \mathbf{u} + \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}^T) : \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} + \lambda (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v})\} \, d\Gamma, \quad (46)$$

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} \{\mu (\mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{u} + \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}^T) : \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} + \lambda (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v})\} \, d\Gamma, \quad (47)$$

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} \{\mu \mathbb{P} (\nabla_{\Gamma} \mathbf{u} + \nabla_{\Gamma} \mathbf{u}^T) \mathbb{P} : \mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} \mathbb{P} + \lambda (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{v})\} \, d\Gamma. \quad (48)$$

Demonstração. Por brevidade, apresentaremos apenas o cálculo relativo à dupla contração com o termo $\mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{v} \mathbb{P}$ – ver equação (48), que é a parte menos óbvia da prova. A divergência superficial de $\mathbf{v}$ aparece como resultado do Lema A.14.

Assim, utilizando-nos dos Lemas A.8, A.13 e A.19, pomos

$$\mathbb{P}(\nabla_{\Gamma}\mathbf{u} + \nabla_{\Gamma}\mathbf{u}^T)\mathbb{P} : \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{v}\mathbb{P} = (\mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{u}\mathbb{P} + \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{u}^T\mathbb{P}) : \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{v}\mathbb{P} = \quad (49)$$

$$= (\mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{u} + \mathbb{P}^T\nabla_{\Gamma}\mathbf{u}^T\mathbb{P}) : \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{v}\mathbb{P} = (\mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{u} + (\nabla_{\Gamma}\mathbf{u}\mathbb{P})^T\mathbb{P}) : \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{v}\mathbb{P} = \quad (50)$$

$$= (\mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{u} + \nabla_{\Gamma}\mathbf{u}^T\mathbb{P}) : \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{v}\mathbb{P} = \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{u} : \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{v} + \nabla_{\Gamma}\mathbf{u}^T\mathbb{P} : \mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{v}\mathbb{P} = \quad (51)$$

$$= P_{ik}u_{k,j}P_{il}v_{l,j} + u_{k,i}P_{kj}P_{il}v_{l,j} = P_{ki}P_{il}u_{k,j}v_{l,j} + u_{k,i}P_{il}v_{l,j}P_{jk} = \quad (52)$$

$$= P_{kl}u_{k,j}v_{l,j} + u_{k,l}v_{l,k} = (\mathbb{P}\nabla_{\Gamma}\mathbf{u} + \nabla_{\Gamma}\mathbf{u}^T) : \nabla_{\Gamma}\mathbf{v}. \quad (53)$$

■

A forma bilinear $\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) : H^1(\Gamma)^3 \times H^1(\Gamma)^3 \rightarrow \mathbb{R}$ não é coerciva em $H^1(\Gamma)^3$ já que existe um subespaço $K \subset H^1(\Gamma)^3 \ni \tilde{\mathbf{v}}$ tal que $\mathcal{B}(\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{\mathbf{v}}) = 0$. No que se segue, utilizamos a notação de Newton para derivada temporal (a “notação ponto”).

Lema B.3. *Seja $\mathbf{Q}$ um tensor ortogonal. Assim, $\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^T\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{0}$. Ainda mais, $\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T$ é antissimétrico.*

Demonstração. Por definição,

$$\mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbb{I}, \quad (54)$$

$$\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbb{I}, \quad (55)$$

as quais implicam que $\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}^{-1}$. Derivando (54) com relação ao tempo, resulta

$$\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^T\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{0}, \quad (56)$$

$$\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q} = -\mathbf{Q}^T\dot{\mathbf{Q}}. \quad (57)$$

Já que $\dot{\mathbf{Q}}^T = \dot{\mathbf{Q}}^T$ (i.e., a derivada temporal de $\mathbf{Q}^T$ é igual a transposta de $\dot{\mathbf{Q}}$), a transposta de $\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q}$ é

$$(\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q})^T = \mathbf{Q}^T(\dot{\mathbf{Q}}^T)^T = \mathbf{Q}^T(\dot{\mathbf{Q}}^T)^T = \mathbf{Q}^T\dot{\mathbf{Q}} \stackrel{(57)}{=} -\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q}. \quad (58)$$

Em suma, $(\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q})^T = -\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q}$, de onde concluímos que $\dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Q}$ é antissimétrico. ■

Teorema B.4. *Por inspeção da forma bilinear $\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$, $\tilde{\mathbf{v}}$ deve satisfazer*

$$D_{\Gamma}\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{0} \text{ em } \Gamma, \quad (59)$$

de modo que movimentos rígidos pertençam ao subespaço K .

Demonstração. Seja $\mathbf{Q}$ uma matriz de rotação e, portanto, ortogonal. Um movimento rígido qualquer é descrito por (Gurtin, 1981)

$$\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{b} + \mathbf{Q}\mathbf{x}, \quad (60)$$

em que $\mathbf{b}$ independe de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}(\mathbf{x})$. Adicionalmente,

$$\mathbf{x} = \mathbf{Q}^{-1}(\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{b}) = \boldsymbol{\varphi}^{-1}, \quad (61)$$

em que $\boldsymbol{\varphi}^{-1}$ deve ser pensada como função da variável $\boldsymbol{\varphi}$. Ademais, as velocidades euleriana e lagrangiana relacionam-se por $\tilde{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})) = \dot{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})$, ou, ainda,

$$\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \dot{\boldsymbol{\varphi}}(\boldsymbol{\varphi}^{-1}(\mathbf{x})). \quad (62)$$

Derivando a equação (60) com relação ao tempo

$$\dot{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) = \dot{\mathbf{b}} + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{x}, \quad (63)$$

e das equações (61) e (62), segue que

$$\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \dot{\boldsymbol{\varphi}}(\boldsymbol{\varphi}^{-1}(\mathbf{x})) = \dot{\mathbf{b}} + \dot{\mathbf{Q}}(\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{b})), \quad (64)$$

$$\therefore \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \dot{\mathbf{b}} + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{x} - \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{b}. \quad (65)$$

Por facilidade, seja $\mathbf{A} \doteq \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^{-1} = \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T$. Assim sendo, $\tilde{w}_i = \dot{b}_i + A_{ij}x_j - A_{ij}b_j$ e então $\nabla\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{A}$. Por fim,

$$D_{\Gamma}\tilde{\mathbf{v}} = \mathbb{P}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)\mathbb{P} = \mathbb{P} \overbrace{(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)}^{=0, \text{ Lema B.3}} \mathbb{P} = \mathbf{0}. \quad (66)$$

■

Dependendo da forma geométrica da superfície Γ , podem existir *outros* campos em K . Se Γ é um cilindro, por exemplo, existem infinitos movimentos tais que para $\tilde{\mathbf{v}} \in H^1(\Gamma)^3$, tem-se $D_{\Gamma}\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{0} \ \forall \mathbf{x} \in \Gamma$. Por outro lado, se Γ é uma superfície fechada de classe C^2 , pode acontecer que K contenha apenas movimentos rígidos como consequência do Teorema de Weyl; se Γ é uma superfície convexa de classe C^2 , não há outra imersão isométrica C^2 em $\mathbb{R}^3$ além da identidade (Nash, 1954; Kuiper, 1955).

C. Rudimentos de topologia de superfícies

C.1. Característica de Euler

É um invariante topológico, um número inteiro que descreve a forma ou a estrutura de um espaço topológico independentemente da forma como ele é dobrado. A característica de Euler é classicamente definida para a superfície de um dado poliedro, de acordo com a fórmula

$$\mathcal{X} = V - E + F, \quad (67)$$

em que V, E e F são os respectivos números de vértices, arestas e faces do poliedro (Sampaio, 2008). Por exemplo, para um cubo, $\mathcal{X} = 8 - 12 + 6 = 2$. Uma esfera também possui característica de Euler igual a 2, exatamente por esta ser topologicamente equivalente a um cubo.

C.2. Gênero

O gênero de uma superfície é um invariante topológico, definido como o número máximo de curvas fechadas simples que não se cruzam e que podem ser desenhadas na superfície sem que superfície resultante fique desconexa. Em termos simples, o *gênero de uma superfície* é o número de *buracos* desta.

A característica de Euler de uma superfície S , orientável e fechada, pode ser expressa em termos do seu respectivo gênero (Sampaio, 2008), a saber,

$$\mathcal{X}(S) = 2(1 - g). \quad (68)$$

Por exemplo, pode-se cortar o toro ao longo de uma curva fechada que segue *um* dos dois círculos geratrizes, ficando em cada caso um cilindro conexo. Qualquer corte adicional resultaria numa superfície desconexa (ver Figura 1). Assim sendo, o gênero de um toro é um. No caso de uma esfera qualquer, toda curva fechada simples sobre ela a dividirá em duas partes e então seu gênero é zero.

C.3. Teorema de Gauss-Bonnet

Seja S uma superfície de Riemann bidimensional fechada. Então a integral da curvatura gaussiana sobre a superfície é $2\pi \mathcal{X}(S)$, ou, em termos de g via (68),

$$\oint_S K dS = 4\pi(1 - g). \quad (69)$$

Esse resultado é bastante notável, pois a curvatura gaussiana *total* tem natureza geométrico-diferencial, enquanto a característica de Euler é um invariante topológico que

Figura 1: Há dois “tipos” de curvas ao longo das quais o toro pode ser cortado e ainda assim manter-se conexo (*e.g.* curvas azul e vermelha). Embora haja duas possibilidades, só podemos escolher uma (ou outra) curva, caso contrário as curvas se interceptariam.

independe da geometria da superfície S . Então, se uma superfície for distorcida, ou seja, se sua curvatura for alterada em qualquer lugar geométrico desta, a curvatura *gaussiana* total da superfície será conservada, independentemente de como as distorções sejam feitas.

D. Curvas planas e geometrias lipossomais de energia mínima

D.1. Formas bidimensionais

Utilizamos a parametrização por comprimento de arco pondo $\gamma(s) = (x(s), y(s))$ e $\kappa = \kappa(s)$. Assim sendo, um resultado clássico de geometria diferencial (ver Toponogov (2006), por exemplo) é que as coordenadas $x(s)$ e $y(s)$ de γ satisfazem

$$(x')^2 + (y')^2 = 1, \quad \forall s. \quad (70)$$

Ainda, derivando-a com relação a s ,

$$x'x'' + y'y'' = 0, \quad \forall s. \quad (71)$$

Além disso, em função de x e y , a curvatura de uma curva plana é dada por

$$\kappa = \frac{x'y'' - y'x''}{(x'^2 + y'^2)^{3/2}}. \quad (72)$$

Assim, definindo-se as variáveis auxiliares $v \doteq x'$, $w \doteq y'$ e $z \doteq \kappa'$, da equação (3.14), a saber,

$$c_{\text{CH}} \left(\kappa'' + \frac{\kappa^3}{2} \right) - \sigma \kappa + p = 0, \quad (73)$$

e das equações (70), (71) e (72) resulta o sistema

$$\left\{ \begin{array}{lcl} v' & = & -w\kappa \\ w' & = & v\kappa \\ x' & = & v \\ y' & = & w \\ \kappa' & = & z \\ z' & = & -\frac{\kappa^3}{2} + \frac{\sigma}{c_{\text{CH}}} \kappa - \frac{p}{c_{\text{CH}}} \end{array} \right. \quad (74)$$

em que x, y, κ, v, w, z são funções de s . O estado estacionário de menor energia (mínimo local) da membrana é dado pelo espaço de fase y versus x .

O sistema de equações (74) foi resolvido numericamente pelo método de Runge-Kutta de 4.^a ordem clássico, com a condição inicial $v(0) = 1$, $w(0) = z(0) = x(0) = y(0) = 0$ e com um valor não-nulo para $\kappa(0)$, convenientemente escolhido para cada solução. Para a obtenção de possíveis soluções de interesse, impusémos o valor de c_{CH} e ajustamos os valores de σ , p e $\kappa(0)$ pelo método do tiro (*shooting method*) utilizando uma busca dicotômica em um desses

parâmetros até a solução ser uma curva através do eixo das ordenadas (sem autointerseções). Assim, as configurações de energia mínima foram construídas unindo-se as curvas do procedimento acima com suas respectivas simétricas em relação ao eixo y . Resta-nos agora mencionar como estimamos o erro.

Para curvas simétricas em relação a uma reta horizontal qualquer, pudemos ter um controle especial do erro. Justamente, dada tal simetria, o erro foi controlado inspecionando-se o módulo da diferença relativa entre as curvaturas inicial e final. Formalmente, denotando por s_f o valor final de s para o qual a curva discreta intercepta o eixo das ordenadas, segue que $e_\kappa = [\kappa(s_f) - \kappa(0)] / \kappa(0)$ é uma medida do erro desejado. Para as tais soluções com simetria vertical, satisfiz-se $|e_\kappa| < 10^{-4}$. Não sendo este o caso (como no caso da forma de 3 lóbulos da Figura 3.1), restou-nos fazer uma busca dicotômica tão precisa quanto possível (até que a alteração no valor do parâmetro de busca resultasse em uma curva que também interceptava o eixo y uma única vez).

Para calcular os valores de comprimento e área delimitada pela curva discreta, utilizamos o espaço de fase y versus x . O comprimento ℓ foi facilmente calculado somando-se as distâncias euclidianas entre pontos consecutivos (diretamente, isto também é dado por s_f). Para o cálculo de área, bastou escolher um ponto P interior a curva fechada e somar a área dos triângulos formados por dois pontos consecutivos e o ponto P .

D.2. Formas tridimensionais axissimétricas

Para uma superfície radialmente simétrica em relação ao eixo y , a curvatura média escalar é

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2, \quad (75)$$

com

$$\kappa_1 = \frac{x' y'' - y' x''}{(x'^2 + y'^2)^{3/2}} \quad (76)$$

e

$$\kappa_2 = \begin{cases} \frac{y'}{x}, & \text{se } x \neq 0 \\ \kappa_1, & \text{se } x = 0 \end{cases}. \quad (77)$$

A equação (76) é simplesmente a curvatura de uma curva plana na forma parametrizada. Não obstante, para uma superfície de revolução gerada pela rotação de uma curva plana $(x(s), y(s))$, surge um termo adicional da curvatura gerada pela própria revolução. Já que escolhemos o eixo y como eixo de revolução, então $\kappa_2 = y'/x$ (em vez de $-x'/y$, que seria rotação em torno do eixo x ; a troca de sinal se deve a orientação positiva).

Ainda mais, para configuração axissimétricas $\nabla_\gamma^2 \kappa$ é dado por²

$$\nabla_\gamma^2 \kappa = \begin{cases} \kappa'' + \frac{x'}{x} \kappa', & \text{se } x \neq 0 \\ 2\kappa'', & \text{se } x = 0 \end{cases}. \quad (78)$$

Utilizando a equação (78) e substituindo a derivada desta em (76), e as equações (76) e (77) na equação (75),

$$\begin{cases} x' y'' - y' x'' = \kappa - \frac{y'}{x}, & \text{se } x \neq 0 \\ y' y'' + x' x'' = 0 \end{cases} \quad (79)$$

e

$$\begin{cases} x' y'' - y' x'' = \frac{\kappa}{2}, & \text{se } x = 0. \\ y' y'' + x' x'' = 0 \end{cases} \quad (80)$$

Resolvendo pela regra de Cramer o conjunto de equações (79) e (80) para x'' e y'' , resulta

$$\begin{cases} y'' = x' \left(\kappa - \frac{y'}{x} \right) = x' \kappa - \frac{x' y'}{x} \\ x'' = -y' \left(\kappa - \frac{y'}{x} \right) = -y' \kappa + \frac{y'^2}{x} \end{cases}, \text{ se } x \neq 0 \quad (81)$$

e

$$\begin{cases} y'' = x' \frac{\kappa}{2} \\ x'' = -y' \frac{\kappa}{2} \end{cases}, \text{ se } x = 0. \quad (82)$$

²Ver Mayer & Simonett (2002).

Definindo-se as variáveis $v \doteq x'$, $w \doteq y'$ e $z \doteq \kappa'$ e substituindo-as em (78), (81) e (82),

$$\left\{ \begin{array}{l} x' = v \\ y' = w \\ \kappa' = z \\ v' = \begin{cases} -w\kappa + \frac{w^2}{x}, & \text{se } x \neq 0 \\ -w\frac{\kappa}{2}, & \text{se } x = 0 \end{cases} \\ w' = \begin{cases} v\kappa - \frac{vw}{x}, & \text{se } x \neq 0 \\ v\frac{\kappa}{2}, & \text{se } x = 0 \end{cases} \\ z' = \begin{cases} -\frac{\kappa^3}{2} + \frac{\sigma}{c_{\text{CH}}}\kappa - \frac{p}{c_{\text{CH}}} - \frac{vz}{x} + 2\kappa\left(\kappa - \frac{\kappa}{x}\right), & \text{se } x \neq 0 \\ \frac{1}{2c_{\text{CH}}}(\sigma\kappa - p), & \text{se } x = 0 \end{cases} \end{array} \right. , \quad (83)$$

em que x, y, κ, v, w, z são funções de s .

Elaboramos o seguinte teste para verificação da implementação do método de Runge-Kutta de 4.^a ordem clássico para solução do sistema (83). Escolhemos a condição inicial $v(0) = 1$, $w(0) = z(0) = x(0) = y(0) = 0$ e para obter uma esfera de raio 2 como solução (em particular, pela rotação em torno do eixo y de um semicírculo pertencente ao semiplano $x \geq 0$), $\kappa(0) = 1$, e, conseqüentemente, $\sigma = 1$ e $p = 0.5$. Desta forma, obtemos κ constante pois κ' e z' serão nulos para todo s . Obtivemos κ e z constantes: $\kappa = 1$ e $z = 0$ e, como esperado, uma esfera de raio 2. Ainda mais, para verificar analiticamente se o sistema (83) realmente representa formas tridimensionais axissimétricas de energia mínima, utilizamos a parametrização³ $x(s) = R \sin \theta$ e $y(s) = R - R \cos \theta$, com $\theta = s/R$ medido a partir da origem $(0,0)$ no sentido anti-horário e $\theta \in [0; \pi]$; as igualdades do sistema (83) foram verificadas. Os resultados numéricos apresentaram apenas erro de arredondamento.

Impondo valores para σ, p e c_{CH} procedemos então a calcular formas de equilíbrio com simetria de revolução. Após fazê-lo, reescalamos a área para o valor desejado $\mathcal{A}_0 = 4\pi$, apenas multiplicando as coordenadas x e y pelo fator de escala $R_0 = \sqrt{\mathcal{A}_0/\mathcal{A}}$. Na geometria transformada, portanto, a tensão superficial equivalente escala como $1/R_0^2$. Dada sua propriedade fundamental de invariância de escala, o volume reduzido v_{3D} é preservado.

³Notemos que tal parametrização obedece a equação (78).

E. Escoamento de uma superfície cilíndrica viscosa com rigidez de curvatura: solução analítica

A formulação variacional pode ser resolvida considerando-se uma tensão/deformação tangencial *uniforme* de uma superfície cilíndrica Γ_c de raio R , em que, $\forall (x, y) \in \Gamma_c$ vale a igualdade $R^2 = x^2 + y^2$. Para tanto, consideremos um espaço de velocidades $\mathbf{W}$ que contenha exclusivamente campos de velocidade da forma

$$\mathbf{w}_{\{\tilde{\mathbf{e}}_r, \tilde{\mathbf{e}}_\theta, \tilde{\mathbf{e}}_z\}} = \begin{bmatrix} w_r \\ w_\theta \\ w_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ 0 \\ c_2 z \end{bmatrix}, \quad (84)$$

em que c_1, c_2 são constantes quaisquer. A rigor, w_z seria $c_2 z + c_3$, em que a constante c_3 representaria apenas um movimento rígido, e por isso sem perda de generalidade podemos impor $c_3 \equiv 0$ e eliminar este grau de liberdade adicional.

Em coordenadas cartesianas,

$$\mathbf{w}_{\{\tilde{\mathbf{e}}_x, \tilde{\mathbf{e}}_y, \tilde{\mathbf{e}}_z\}} = \begin{bmatrix} w_x \\ w_y \\ w_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \frac{x}{R} \\ c_1 \frac{y}{R} \\ c_2 z \end{bmatrix}. \quad (85)$$

Embora $R^2 = x^2 + y^2$ em Γ_c , podemos construir a extensão normal de $\mathbf{w}$ (denotada por $\hat{\mathbf{w}}$) fixando-se R , quer dizer, numa vizinhança $\mathcal{D}_\delta \ni \mathbf{x}$ de Γ_c , $\hat{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}(\Pi_{\Gamma_c}(\mathbf{x}))$. Em outras palavras, $\hat{\mathbf{w}}$ é constante longo da direção radial (isto é, normal) de modo que $\hat{\mathbf{w}}|_{\Gamma_c} = \mathbf{w}$. Em nome de uma notação mais limpa e concisa, daqui por diante cometeremos o abuso de nos referirmos a extensão normal $\hat{\mathbf{w}}$ apenas como $\mathbf{w}$.

Deste modo,

$$\nabla \mathbf{w} = \begin{bmatrix} \frac{c_1}{R} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{c_1}{R} & 0 \\ 0 & 0 & c_2 \end{bmatrix} \quad (86)$$

Assim sendo, na base cartesiana o tensor $\mathbb{P} \doteq \mathbb{I} - \tilde{\mathbf{n}} \otimes \tilde{\mathbf{n}}$ é

$$\mathbb{P}_{\{\tilde{\mathbf{e}}_x, \tilde{\mathbf{e}}_y, \tilde{\mathbf{e}}_z\}} = \begin{bmatrix} \frac{y^2}{R^2} & -\frac{xy}{R^2} & 0 \\ -\frac{xy}{R^2} & \frac{x^2}{R^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (87)$$

já que $\check{\mathbf{n}} = \check{\mathbf{e}}_r = \frac{x}{R}\check{\mathbf{e}}_x + \frac{y}{R}\check{\mathbf{e}}_y$. E assim,

$$\nabla_{\Gamma} \mathbf{w}_{\{\check{\mathbf{e}}_x, \check{\mathbf{e}}_y, \check{\mathbf{e}}_z\}} = \nabla \mathbf{w} \mathbb{P} = \begin{bmatrix} \frac{c_1 y^2}{R^3} & -\frac{c_1 xy}{R^3} & 0 \\ -\frac{c_1 xy}{R^3} & \frac{c_1 x^2}{R^3} & 0 \\ 0 & 0 & c_2 \end{bmatrix} = \nabla_{\Gamma} \mathbf{w}_{\{\check{\mathbf{e}}_x, \check{\mathbf{e}}_y, \check{\mathbf{e}}_z\}}^T. \quad (88)$$

E então $D_{\Gamma} \mathbf{w} \doteq \frac{1}{2} \mathbb{P} (\nabla_{\Gamma} \mathbf{w} + \nabla_{\Gamma} \mathbf{w}^T) \mathbb{P} \stackrel{(88)}{=} \mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{w} \mathbb{P} \stackrel{\text{Corolário A.13}}{=} \mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{w} \stackrel{(88)}{=} \mathbb{P} \nabla_{\Gamma} \mathbf{w}^T \stackrel{\text{Lema A.12}}{=} \mathbb{P} (\nabla \mathbf{w} \mathbb{P})^T = \mathbb{P} \mathbb{P}^T \nabla \mathbf{w}^T \stackrel{\text{Lema A.8}}{=} \mathbb{P}^T \nabla \mathbf{w}^T = (\nabla \mathbf{w} \mathbb{P})^T \stackrel{\text{Lema A.12}}{=} \nabla_{\Gamma} \mathbf{w}^T \stackrel{(88)}{=} \nabla_{\Gamma} \mathbf{w}.$

Além disso,

$$\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{w} = \text{tr}(\nabla_{\Gamma} \mathbf{w}) = \frac{c_1(x^2 + y^2)}{R^3} + c_2 = \frac{c_1}{R} + c_2. \quad (89)$$

Considerando ainda que $\mathbf{u}$ é da mesma forma de $\mathbf{w}$,

$$\mathbf{u}_{\{\check{\mathbf{e}}_x, \check{\mathbf{e}}_y, \check{\mathbf{e}}_z\}} = \begin{bmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_r \frac{x}{R} \\ U_r \frac{y}{R} \\ bz \end{bmatrix}. \quad (90)$$

Diretamente da definição $\boldsymbol{\sigma} \doteq \lambda \nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{u} + 2\mu D_{\Gamma} \mathbf{u}$ resulta

$$\boldsymbol{\sigma}_{\{\check{\mathbf{e}}_x, \check{\mathbf{e}}_y, \check{\mathbf{e}}_z\}} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{xy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix}, \quad (91)$$

em que,

$$\sigma_{xx} = by^2/R^2, \quad (92)$$

$$\sigma_{yy} = bx^2/R^2, \quad (93)$$

$$\sigma_{zz} = a(\lambda + 2\mu) + \lambda(U_r/R), \quad (94)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = -axy/R^2, \quad (95)$$

sendo a constante b dada por $b \doteq (\lambda + 2\mu)(U_r/R) + \lambda a$. Observamos que $\boldsymbol{\sigma} \cdot \check{\mathbf{n}} = \mathbf{0}$.

Lembrando que o vetor curvatura pode ser expresso por $\boldsymbol{\kappa} = \kappa \check{\mathbf{n}} = \frac{1}{R} \check{\mathbf{n}}$, segue que

$$\nabla \boldsymbol{\kappa} = \frac{1}{R^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (96)$$

$$\nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} = \nabla \boldsymbol{\kappa} \mathbb{P} = \frac{1}{R^4} \begin{bmatrix} y^2 & -xy & 0 \\ -xy & x^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (97)$$

e, conseqüentemente,

$$\nabla_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa} = \text{tr}(\nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa}) = \frac{y^2 + x^2}{R^4} = \frac{1}{R^2}. \quad (98)$$

Prosseguindo com o cálculo dos termos restantes que aparecem na formulação variacional, temos

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} : D_{\Gamma} \mathbf{w} &= \frac{Ac_1}{R} + c_2 \left[(\lambda + 2\mu)a + \lambda \frac{U_r}{R} \right], \\ &= c_1 \left[\frac{(\lambda + 2\mu)U_r}{R^2} + \frac{\lambda a}{R} \right] + c_2 \left[(\lambda + 2\mu)a + \lambda \frac{U_r}{R} \right], \end{aligned} \quad (99)$$

e

$$(\mathbb{I} - 2\mathbb{P}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{w} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} = -\frac{c_1}{R^3}. \quad (100)$$

Por fim, substituindo-os na formulação variacional,

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) + d\mathcal{E}(\Gamma_c, \mathbf{w}) = \mathcal{F}(\mathbf{w}) \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{W}, \quad (101)$$

em que $\mathcal{F}(\mathbf{w})$ é dado por

$$\mathcal{F}(\mathbf{w}) \doteq p_b \int_{\Gamma_c} \mathbf{w} \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\Gamma + \int_{\partial\Gamma_c} \mathbf{f} \cdot \mathbf{w} \partial d\Gamma, \quad (102)$$

sendo a força por unidade de comprimento $\mathbf{f} = [0 \ 0 \ f_z]^T$ e p_b a pressão que o fluido ambiente exerce sobre a membrana, esta última conhecida *a priori*. Alternativamente, porém, p_b poderia ser computada impondo-se a preservação do volume. Assim,

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_c} \boldsymbol{\sigma} : D_{\Gamma} \mathbf{w} d\Gamma + c_{\text{CH}} \int_{\Gamma_c} \left[(\mathbb{I} - 2\mathbb{P}) \nabla_{\Gamma} \mathbf{w} : \nabla_{\Gamma} \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} (\nabla_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa}) (\nabla_{\Gamma} \cdot \mathbf{w}) \right] d\Gamma = \\ = p_b \int_{\Gamma_c} \mathbf{w} \cdot \tilde{\mathbf{n}} d\Gamma + \int_{\partial\Gamma_c} \mathbf{f} \cdot \mathbf{w} d\partial\Gamma \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{W}, \end{aligned} \quad (103)$$

da qual, $\forall c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ tem-se

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_c} \left\{ c_1 \left[\frac{(\lambda + 2\mu)U_r}{R^2} + \frac{\lambda a}{R} \right] + c_2 \left[(\lambda + 2\mu)a + \lambda \frac{U_r}{R} \right] \right\} d\Gamma + \\ & + c_{\text{CH}} \int_{\Gamma_c} \left\{ -\frac{c_1}{R^3} + \frac{1}{2} \frac{1}{R^2} \left(\frac{c_1}{R} + c_2 \right) \right\} d\Gamma = p_{\text{B}} \int_{\Gamma_c} c_1 d\Gamma + c_2 \int_{\partial\Gamma_c} f_z z d\partial\Gamma, \end{aligned} \quad (104)$$

que torna-se

$$\begin{aligned} & \left\{ c_1 \left[\frac{(\lambda + 2\mu)U_r}{R^2} + \frac{\lambda a}{R} - \frac{c_{\text{CH}}}{2R^3} \right] + c_2 \left[(\lambda + 2\mu)a + \lambda \frac{U_r}{R} + \frac{c_{\text{CH}}}{2R^2} \right] \right\} 2\pi RL = \\ & = p_{\text{B}} c_1 2\pi RL + c_2 LF, \end{aligned} \quad (105)$$

em que F denota a força aplicada. Dividindo ambos os lados por $2\pi RL$,

$$\begin{aligned} & c_1 \left[\frac{(\lambda + 2\mu)U_r}{R^2} + \frac{\lambda a}{R} - \frac{c_{\text{CH}}}{2R^3} \right] + c_2 \left[(\lambda + 2\mu)a + \lambda \frac{U_r}{R} + \frac{c_{\text{CH}}}{2R^2} \right] = \\ & p_{\text{B}} c_1 + \frac{c_2 F}{2\pi R}. \end{aligned} \quad (106)$$

Sendo tal igualdade válida $\forall c_1, c_2$, se $c_2 = 0$,

$$\frac{(\lambda + 2\mu)U_r}{R^2} + \frac{\lambda a}{R} - \frac{c_{\text{CH}}}{2R^3} = p_{\text{B}}, \quad (107)$$

ao passo que se $c_1 = 0$,

$$(\lambda + 2\mu)a + \lambda \frac{U_r}{R} + \frac{c_{\text{CH}}}{2R^2} = \frac{F}{2\pi R}. \quad (108)$$

Assim, temos o seguinte sistema de equações para U_r e a ,

$$\begin{cases} \frac{(\lambda + 2\mu)}{R^2} U_r + \frac{\lambda}{R} a = p_{\text{B}} + \frac{c_{\text{CH}}}{2R^3} \\ \frac{\lambda}{R} U_r + (\lambda + 2\mu) a = \frac{F}{2\pi R} - \frac{c_{\text{CH}}}{2R^2} \end{cases},$$

cuja solução é

$$U_r = -\frac{\lambda F}{8\pi\mu(\lambda + \mu)} + \frac{(\lambda + 2\mu) p_{\text{B}}}{4\mu(\lambda + \mu)} R^2 + \frac{c_{\text{CH}}}{4\mu} \frac{1}{R}, \quad (109)$$

$$a = \frac{(\lambda + 2\mu)F}{8\pi\mu(\lambda + \mu)} \frac{1}{R} - \frac{\lambda p_{\text{B}}}{4\mu(\lambda + \mu)} R - \frac{c_{\text{CH}}}{4\mu} \frac{1}{R^2}. \quad (110)$$

Ademais, U_r pode ser escrito ainda como

$$U_r = -\frac{\lambda}{8\pi\mu(\lambda+\mu)} \left[F - \frac{2\pi}{\lambda} \left(p_B(\lambda+2\mu)R^2 + (\lambda+\mu)c_{CH}\frac{1}{R} \right) \right]. \quad (111)$$

Para cada força aplicada há um raio de equilíbrio R_{eq} para o qual não há movimento na direção radial (ou seja, $U_r(R=R_{eq})=0$), e então F pode ser dada em função de R_{eq} como

$$F = \frac{2\pi}{\lambda} \left(p_B(\lambda+2\mu)R_{eq}^2 + \frac{(\lambda+\mu)c_{CH}}{R_{eq}} \right). \quad (112)$$

Assim sendo, a é dado por

$$a = \frac{p_B(\lambda+2\mu)^2 R_{eq}^2}{4\lambda\mu(\lambda+\mu)} \frac{1}{R} + \frac{(\lambda+2\mu)c_{CH}}{4\lambda\mu R_{eq}} \frac{1}{R} - \frac{\lambda p_B}{4\mu(\lambda+\mu)} R - \frac{c_{CH}}{4\mu} \frac{1}{R^2}. \quad (113)$$

No equilíbrio, $a(R=R_{eq})$ é dado por

$$\begin{aligned} a(R=R_{eq}) &\doteq a^{U_r=0} = \\ &= \frac{p_B(\lambda+2\mu)^2 R_{eq}}{4\lambda\mu(\lambda+\mu)} + \frac{(\lambda+2\mu)c_{CH}}{4\lambda\mu R_{eq}^2} - \frac{\lambda p_B R_{eq}}{4\mu(\lambda+\mu)} - \frac{c_{CH}}{4\mu R_{eq}^2}. \end{aligned} \quad (114)$$

No caso em que a membrana é inextensível ($\lambda \rightarrow \infty$), e as equações acima reduzem-se a

$$U_r = -\frac{1}{8\pi\mu} \left[F - 2\pi \left(p_B R^2 + c_{CH} \frac{1}{R} \right) \right], \quad (115)$$

$$a = \frac{F}{8\pi\mu} \frac{1}{R} - \frac{p_B}{4\mu} R - \frac{c_{CH}}{4\mu} \frac{1}{R^2}, \quad (116)$$

$$F = 2\pi \left(p_B R_{eq}^2 + c_{CH} \frac{1}{R_{eq}} \right), \quad (117)$$

$$a^{U_r=0} = 0. \quad (118)$$

Para o caso extensível, como estabelecido pelo Lema A.14,

$$\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} = \mathbb{P} : \nabla \mathbf{u} = \frac{1}{R} U_r + a = \frac{F}{4\pi(\lambda+\mu)R}, \quad (119)$$

Para o caso inextensível, de fato, $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} = 0$ a partir das equações (115) e (116).

Assim sendo, da equação (2.54) segue que a pressão superficial π_s é dada por

$$\pi_s = -\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{u} = -\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{F}{4\pi(1+\frac{\mu}{\lambda})R} = -\frac{F}{4\pi R}. \quad (120)$$

A variação temporal do raio R do cilindro é dada pela velocidade radial U_r . Então, no caso incompressível,

$$\frac{dR}{dt} = U_r. \quad (121)$$

Escrevendo-se tal velocidade como

$$U_r = -\frac{1}{8\pi\mu} \left[F - 2\pi c_{CH} \frac{1}{R} \left(1 + \frac{p_B R^3}{c_{CH}} \right) \right] \quad (122)$$

e negligenciando a pressão do fluido ambiente, $\left(1 + \frac{p_B R^3}{c_{CH}} \right) \approx 1$, isto é, admitindo que a velocidade é dominada pelo termo proveniente da curvatura, resulta

$$\frac{dR}{dt} = \frac{c_{CH}}{4\mu} \left(\frac{1}{R_{eq}^{p_B \rightarrow 0}} - \frac{1}{R} \right), \quad (123)$$

em que $R_{eq}^{p_B \rightarrow 0}$ é tal que não há movimento na direção radial ($U_r(R_{eq}^{p_B \rightarrow 0}) = 0$) e é dado por

$$R_{eq}^{p_B \rightarrow 0} = \frac{2\pi c_{CH}}{F}. \quad (124)$$

A fim de adimensionalizar tal equação, definimos as seguintes quantidades adimensionais

$$r \doteq \frac{R}{R_{eq}^{p_B \rightarrow 0}}, \quad (125)$$

$$\tau \doteq \frac{t}{\tau}, \quad (126)$$

$$\tau \doteq \frac{4\mu(R_{eq}^{p_B \rightarrow 0})^2}{c_{CH}}, \quad (127)$$

de modo que a equação (123) torna-se

$$\frac{dr}{d\tau} = \frac{1}{r} - 1 = \frac{1-r}{r}. \quad (128)$$

Pondo $r_0 = r(\tau = 0)$ como condição inicial, a solução de tal equação é

$$r_0 - r + \ln \left| \frac{1-r_0}{1-r} \right| = \tau, \quad (129)$$

que embora não possa ser explicitada para $r(\tau)$, pode ser entendida qualitativamente através das Figuras 2 e 3. Para instantes em que se tem $r > 1$, isto quer dizer que $R > R_{eq}^{p_B \rightarrow 0}$ e então R decresce assintoticamente até o valor $R_{eq}^{p_B \rightarrow 0}$ pois na força resultante predomina a força axial F aplicada (que tende a fazer com que o cilindro tenha seu raio diminuído – velocidade radial negativa). Contrariamente, se $r < 1$ então $R < R_{eq}^{p_B \rightarrow 0}$ e R cresce até o valor $R_{eq}^{p_B \rightarrow 0}$ devido as forças de curvatura de Canham-Helfrich; nessa situação é energeticamente favorável que o

cilindro aumente de raio, pois assim a curvatura decresce e por conseguinte assim também o faz a sua respectiva energia.

Figura 2: Valor da coordenada radial de um cilindro viscoso (inextensível) quando submetido a uma força axial constante, como função do tempo (em quantidades adimensionais).

Figura 3: Velocidade radial de uma superfície cilíndrica viscosa (inextensível) quando submetida a uma força axial constante, como função do tempo (em quantidades adimensionais).

A dissipação viscosa de energia (ou potência dissipada por unidade de área), é dada por

$$\boldsymbol{\sigma} : D_{\Gamma} \mathbf{u} = \lambda \left(\frac{U_r}{R} + a \right)^2 + 2\mu \left(\frac{U_r^2}{R^2} + a^2 \right), \quad (130)$$

que, no caso inextensível reduz-se a

$$\boldsymbol{\sigma} : D_{\Gamma} \mathbf{u} = 2\mu \left(\frac{1}{R^2} U_r^2 + a^2 \right) = 4\mu a^2. \quad (131)$$

Como disposto no Capítulo 4, esse belo exemplo em simetria cilíndrica serve de modelo para se estudar o comportamento mecânico de um *tether*, inclusive do ponto de vista numérico-computacional.

Referências

- Aingaran, M.; Zhang, R.; Law, S. K.; Peng, Z.; Undisz, A.; Meyer, E.; Diez-Silva, M.; Burke, T. A.; Spielmann, T.; Lim, C. T.; Suresh, S.; Dao, M.; Marti, M. (2012). Host cell deformability is linked to transmission in the human malaria parasite plasmodium falciparum. *Cell. Microbiol.*, v.14, n.7, p.983–993.
- Alberts, B.; Bray, D.; Hopkin, K.; Johnson, A.; Lewis, J.; Raff, M.; Roberts, K.; Walter, P. (2009). *Essential Cell Biology*. Garland Publising, New York.
- Alberts, B.; Johnson, A.; Lewis, J. (2002). *Molecular Biology of the Cell (The Lipid Bilayer)*. Garland Science, New York.
- Amestoy, P. R.; Duff, I. S.; Koster, J.; L'Excellent, J. Y. (2001). A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, v.23, n.1, p.15–41.
- Amestoy, P. R.; Guermouche, A.; L'Excellent, J. Y.; Pralet, S. (2006). Hybrid scheduling for the parallel solution of linear systems. *Parallel Comput.*, v.32, n.2, p.136–156.
- Arroyo, M.; DeSimone, A. (2009). Relaxation dynamics of fluid membranes. *Phys. Rev. E*, v.79, p.031915.
- Arroyo, M.; DeSimone, A.; Heltai, L. (2010). The role of membrane viscosity in the dynamics of fluid membranes. Technical Report, arXiv:1007.4934.
- Ashkin, A. (1997). Optical trapping and manipulation of neutral particles using lasers. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.94, n.10, p.4853–4860.
- Ausas, R. E.; Sousa, F. S.; Buscaglia, G. C. (2010). An improved finite element space for discontinuous pressures. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.*, v.199, n.17–20, p.1019–1031.
- Bänsch, E. (2001). Finite element discretization of the Navier–Stokes equations with a free capillary surface. *Numer. Math.*, v.88, n.2, p.203–235.
- Bänsch, E.; Morin, P.; Nochetto, R. (2005). A finite element method for surface diffusion: the parametric case. *J. Comput. Phys.*, v.203, n.1, p.321–343.

- Barrett, J. W.; Garcke, H.; Nürnberg, R. (2015). Numerical computations of the dynamics of fluidic membranes and vesicles. Preprint, arXiv:1504.05424.
- Baumgart, T.; Hess, S. T.; Webb, W. (2003). Imaging coexisting fluid domains in biomembrane models coupling curvature and line tension. *Nature*, v.425, n.6960, p.821–824.
- Belkin, M.; Sun, J.; Wang, Y. (2008). Discrete Laplace operator on meshed surfaces. *24th Ann. Symp. Comput. Geom.*, p. 278–287.
- Bernard, Y.; Wheeler, G.; Wheeler, V. (2014). Spherocytosis and the Helfrich model. Preprint, arXiv:1412.3533.
- Bi, E.; Lutkenhaus, J. (1991). FtsZ ring structure associated with division in *Escherichia coli*. *Nature*, v.354, n.6349, p.161–164.
- Boffi, D.; Brezzi, F.; Fortin, M. (2008). Free boundary problems: Theory and applications. Boffi, D.; Gastaldi, L., editores, *Mixed Finite Elements, Compatibility Conditions and Applications*, p. 45–100. Springer-Verlag, Boston.
- Bonito, A.; Nochetto, R. H.; Pauletti, M. S. (2010). Parametric FEM for geometric biomembranes. *J. Comput. Phys.*, v.229, n.9, p.3171–3188.
- Bottino, D.; Mogilner, A.; Roberts, T.; Stewart, M.; Oster, G. (2002). How nematode sperm crawl. *J. Cell Sci.*, v.115, n.2, p.367–384.
- Boussinesq, J. V. (1913). Sur l’existence d’une viscosité superficielle, dans le mince couche de transition separant un liquide d’une autre fluide contigu. *Ann. Chim. Phys.*, v.29, p.349–357.
- Božič, B.; Svetina, S.; Žekš, B. (1997). Theoretical analysis of the formation of membrane microtubes on axially strained vesicles. *Phys. Rev. E*, v.55, p.5834–5842.
- Brenner, S. C.; Scott, L. R. (2008). *The Mathematical Theory of Finite Element Method*. Springer-Verlag, New York.
- Brezzi, F.; Fortin, M. (1991). *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer-Verlag, New York.
- Brezzi, F.; Pitkäranta, J. (1984). On the stabilization of finite element approximations of the Stokes problem. Hackbush, W., editor, *Efficient Solutions of Elliptic Systems*, v. 10 de *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, p. 11–19. Vieweg, Wiesbaden.
- Buscaglia, G.; Basombrío, F.; Codina, R. (2000). Fourier analysis of an equal-order incompressible flow solver stabilized by pressure-gradient projection. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, v.34, p.65–92.

- Buscaglia, G. C. (2015). Continuous and discrete inf-sup conditions for surface incompressibility of a deformable continuum. Preprint, arXiv:1507.07537.
- Buscaglia, G. C.; Ruas, V. (2014). Finite element methods for the Stokes system based on a Zienkiewicz type N-simplex. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.272, n.1, p.83–99.
- Byun, H.; Hillman, T. R.; Higgins, J. M.; Diez-Silva, M.; Peng, Z.; Dao, M.; Dasari, R. R.; Suresh, S.; Parka, Y. (2012). Optical measurement of biomechanical properties of individual erythrocytes from a sickle cell patient. *Acta Biomater.*, v.8, n.11, p.4130–4138.
- Canham, P. (1970). The minimum energy of bending as a possible explanation of the biconcave shape of the human red blood cell. *J. Theor. Biol.*, v.26, n.1, p.61–81.
- Carroll, D.; Hankins, E.; Kose, E.; Sterling, I. (2014). A survey of the differential geometry of discrete curves. *The Mathematical Intelligencer*, v.36, n.4, p.28–35.
- Cermelli, P.; Fried, E.; Gurtin, M. E. (2005). Transport relations for surface integrals arising in the formulation of balance laws for evolving fluid interfaces. *Journal of Fluid Mechanics*, v.544, p.339–351.
- Chen, Y. C.; Fried, E. (2014). Stability and bifurcation of a soap film spanning a flexible loop. *J. Elast.*, v.116, n.1, p.75–100.
- Ciarlet, P. (1978). *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. North Holland, Amsterdam.
- Clark, M. R.; Mohandas, N.; Shohet, S. B. (1983). Osmotic gradient ektacytometry: comprehensive characterization of red cell volume and surface maintenance. *Blood*, v.61, n.5, p.899–910.
- Clément, P. (1975). Approximation by finite element functions using local regularization. *RAIRO Anal. Numer.*, v.9, p.77–84.
- Codina, R. (1993). An iterative penalty method for the finite element solution of the stationary Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.110, n.3–4, p.237–262.
- Codina, R. (2000). On stabilized finite element methods for linear systems of convection-diffusion-reaction equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.188, n.1, p.61–82.
- Codina, R. (2002). Stabilized finite element approximation of transient incompressible flows using orthogonal subscales. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.191, n.39-40, p.4295–4321.

- Codina, R.; Blasco, J. (1997). A finite element formulation for the Stokes problem allowing equal velocity-pressure interpolation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.143, p.373–391.
- Codina, R.; Blasco, J.; Buscaglia, G. C.; Huerta, A. (2001). Implementation of a stabilized finite element formulation for the incompressible Navier-Stokes equations based on a pressure gradient projection. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, v.37, n.4, p.419–444.
- Cohen, J. E. (2001). Mathematics is Biology’s next Microscope, only better; Biology is Mathematics’ next Physics, only better. *PLoS Biol.*, v.2, n.12, p.2017–2023.
- Connelly, R. (1979). The rigidity of polyhedral surfaces. *Mathematics Magazine*, v.52, n.5, p.275–283.
- Deckelnick, K.; Dziuk, G.; Elliott, C. M. (2005). Computation of geometric partial differential equations and mean curvature flow. *Acta Numer.*, v.14, p.139–232.
- Delfour, M. C.; Zolésio, J.-P. (2011). *Shapes and Geometries: Metrics, Analysis, Differential Calculus and Optimization*. Advances in Design and Control. SIAM, Philadelphia, 2a. ed.
- Deuling, H. J.; Helfrich, W. (1976). Red blood cell shapes as explained on the basis of curvature elasticity. *Biophys. J.*, v.16, n.8, p.861–868.
- Dickey, A.; Faller, R. (2008). Examining the contributions of lipid shape and headgroup charge on bilayer behavior. *Biophys. J.*, v.95, n.6, p.2636–2646.
- Dimova, R.; Aranda, S.; Bezlyepkina, N.; Nikolov, V.; Riske, K. A.; Lipowsky, R. (2006). A practical guide to giant vesicles: probing the membrane nanoregime via optical microscopy. *J. Phys.: Cond. Matt.*, v.18, n.28, p.S1151–S1176.
- Ditlev, J. A.; Vacanti, N. M.; Novak, I. L.; Loew, L. M. (2009). An open model of actin dendritic nucleation. *Biophys. J.*, v.96, n.9, p.3529 – 3542.
- Döbereiner, H.-G.; Selchow, O.; Lipowsky, R. (1999). Spontaneous curvature of fluid vesicles induced by trans-bilayer sugar asymmetry. *Eur. Biophys. J.*, v.28, n.2, p.174–178.
- Dobrovinski, K.; Kruse, K. (2011). Cell motility resulting from spontaneous polymerization waves. *Phys. Rev. Lett.*, v.107, n.25, p.258103.
- Douglas, J.; Wang, J. (1989). An absolutely stabilized finite element method for the Stokes problem. *Math. Comput.*, v.52, n.186, p.495–508.
- Dziuk, G. (1988). Finite elements for the Beltrami operator on arbitrary surfaces. *Partial Differential Equations and Calculus of Variations, Lectures Notes in Mathematics*, v.1357, p.142–155.

- Dziuk, G. (1991). An algorithm for evolutionary surfaces. *Numer. Math.*, v.58, p.603–611.
- Dziuk, G. (2008). Computacional parametric Willmore flow. *Numer. Math.*, v.111, p.55–80.
- Dziuk, G.; Elliott, C. M. (2006). Finite elements on evolving surfaces. *IMA J. Numer. Anal.*, v.27, p.262–292.
- Dziuk, G.; Elliott, C. M. (2013). Finite element methods for surface PDEs. *Acta Numer.*, v.22, p.289–396.
- Ericksen, J. L. (1952). Thin liquid jets. *J. Rat. Mech. Anal.*, v.1, p.521–538.
- Ern, A.; Guermond, J.-L. (2004). *Theory and practice of finite elements*. Applied mathematical sciences. Springer-Verlag, New York.
- Euler, L. (1862). Opera postuma, I, *St. Petersburg: Acad. Petropoli*, p.494–496.
- Evans, E.; Yeung, A. (1994). Hidden dynamics in rapid changes of bilayer shape. *Chem. Phys. Lipids*, v.73, p.39–56.
- Evans, E. A. (1971). Quantitative reconstruction and superresolution of red-blood-cell image holograms. *J. Opt. Soc. Am.*, v.61, n.8, p.991–997.
- Evans, E. A.; Fung, Y. C. (1972). Improved measurements of the erythrocyte geometry. *Microvasc. Res.*, v.4, n.4, p.335–347.
- Evans, E. A.; Leblond, P. F. (1973). Geometric properties of individual red blood cell discocyte-spherocyte transformations. *Biorheology*, v.10, n.3, p.393–404.
- Feng, F.; Klug, W. (2006). Finite element modeling of lipid bilayer membranes. *J. Comput. Phys.*, v.220, p.394–408.
- Franca, L.; Frey, S. (1992). Stabilized finite element methods: II. the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.99, p.209–233.
- Franca, L.; Hughes, T. (1993). Convergence analyses of Galerkin Least-Squares methods for symmetric advective-diffusive forms of the Stokes and incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.105, n.2, p.285–298.
- Fygenson, D.; Marko, J.; Libchaber, A. (1997). Mechanics of microtubule-based membrane extension. *Phys. Rev. Lett.*, v.79, p.4497–4500.
- Ganesan, S.; Matthies, G.; Tobiska, L. (2007). On spurious velocities in incompressible flow problems with interfaces. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.196, p.1193–1202.
- Germain, S. (1921). Recherches sur la théorie des surfaces élastiques. Paris.

- Geuzaine, C.; Remacle, J. F. (2009). Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, v.79, n.11, p.1309–1331.
- Girault, V.; Raviart, P.-A. (1986). *Finite Element Method for Navier-Stokes Equations: Theory and Algorithms*. Springer-Verlag, Berlin.
- Gluck, H. (2006). *Almost all simply connected closed surfaces are rigid*. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, New York.
- Grinfeld, P. (2013). *Introduction to Tensor Analysis and the Calculus of Moving Surfaces*. Springer-Verlag, New York.
- Gross, S.; Reusken, A. (2007). An extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows with surface tension. *J. Comput. Phys.*, v.224, p.40–58.
- Gross, S.; Reusken, A. (2011). *Numerical Methods for Two-phase Incompressible Flows*. Springer-Verlag.
- Gurtin, M. E. (1981). *An Introduction to Continuum Mechanics*. Academic Press Inc., London.
- Hai-Tao, H.; Marguet, D. (2011). Detecting nanodomains in living cell membrane by fluorescence correlation spectroscopy. *Ann. Rev. Phys. Chem.*, v.62, n.1, p.417–436. PMID: 21219145.
- Harland, C.; Bradley, M.; Parthasarathy, R. (2010). Phospholipid bilayers are viscoelastic. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.107, p.19146–19150.
- Harland, C.; Bradley, M.; Parthasarathy, R. (2011). Retraction. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.108, p.14705.
- Hecht, I.; Skoge, M. L.; Charest, P. G.; Ben-Jacob, E.; Firtel, R. A.; Loomis, W. F.; Levine, H.; Rappel, W.-J. (2011). Activated membrane patches guide chemotactic cell motility. *PLoS Comput. Biol.*, v.7, n.6, p.e1002044.
- Heine, C. J. (2004). Isoparametric finite element approximation of curvature on hypersurfaces. Preprint.
- Heintz, A. (2015). A numerical method for simulation dynamics of incompressible lipid membranes in viscous fluid. *J. Comput. Appl. Math.*, v.289, p.87–100. Sixth International Conference on Advanced Computational Methods in Engineering (ACOMEN 2014).
- Helfrich, W. (1973). Elastic properties of lipid bilayers – theory and possible experiments. *Z. Naturforsch. C*, v.28, p.693–703.
- Herant, M.; Marganski, W. A.; Dembo, M. (2003). The mechanics of neutrophils: synthetic modeling of three experiments. *Biophys. J.*, v.84, p.3389.

- Holmes, W. R.; Edelstein-Keshet, L. (2012). A comparison of computational models for eukaryotic cell shape and motility. *PLoS Comput. Biol.*, v.8, n.12, p.e1002793.
- Hook, R. (1665). *Micrographia: or some physiological descriptions of minute bodies made by magnifying glasses with observations and inquiries thereupon*. Royal Society, London.
- Hughes, T.; Feijóo, G.; Mazzei, L.; Quincy, J. (1998). The variational multiscale method – a paradigm for computational mechanics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.166, n.1–2, p.3–24.
- Hughes, T.; Franca, L.; Balestra, M. (1986). A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. Circumventing the Babuška-Brezzi condition: a stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.59, p.85–99.
- Jacobson, K.; Sheets, E.; Simson, R. (1995). Revisiting the fluid mosaic model of membranes. *Science*, v.268, n.5216, p.1441–1442.
- Kabaso, D.; Shlomovitz, R.; Schloen, K.; Stradal, T.; Gov, N. S. (2011). Theoretical model for cellular shapes driven by protrusive and adhesive forces. *PLoS Comput. Biol.*, v.7, n.5, p.e1001127.
- Kamal, M. M.; Mills, D.; Grzybek, M.; Howard, J. (2009). Measurement of the membrane curvature preference of phospholipids reveals only weak coupling between lipid shape and leaflet curvature. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.106, n.52, p.22245–22250.
- Kovaszny, L. (1948). Laminar flow behind a two-dimensional grid. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, v.44, n.1, p.58–62.
- Krause, W. J. (2005). *Krause's Essential Human Histology for Medical Students*. Universal Publisher, Boca Raton.
- Kuiper, N. (1955). On C^1 isometric imbeddings I, II. *Proc. Kon. Acad. Wet. Amsterdam A*, v.58, p.545–556, 683–689.
- Kuusela, E.; Alt, W. (2009). Continuum model of cell adhesion and migration. *J. Math. Biol.*, v.58, n.1-2, p.135–161.
- Lee, A. G. (2011). How to understand lipid-protein interactions in biological membranes. Yeagle, P. L., editor, *The Structure of biological membranes*, p. 273–314. CRC Press, Boca Raton, Florida, 3a. ed.
- Lee, H. J.; Peterson, E. L.; Phillips, R.; Klug, W. S.; Wiggins, P. A. (2008). Membrane shape as a reporter for applied forces. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.105, n.49, p.19253–19257.

- Lim, G.; Wortis, M.; Mukhopadhyay, R. (2002). Stomatocyte-discocyte-echinocyte sequence of the human red blood cell: Evidence for the bilayer-couple hypothesis from membrane mechanics. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.99, n.26, p.16766–16769.
- Löhner, R. (1996). Regridding surface triangulations. *J. Comput. Phys.*, v.126, n.1, p.1–10.
- Lovett, D. (1994). *Demonstrating Science with Soap Films*. CRC Press, Boca Raton, Florida.
- Maleki, M.; Fried, E. (2013). Stability of discoidal high-density lipoprotein particles. *Soft Matter*, v.9, p.9991–9998.
- Marée, A. F. M.; Grieneisen, V. A.; Edelstein-Keshet, L. (2012). How cells integrate complex stimuli: The effect of feedback from phosphoinositides and cell shape on cell polarization and motility. *PLoS Comput. Biol.*, v.8, n.3, p.e1002402.
- Marée, A. F. M.; Jilkine, A.; Dawes, A.; Grieneisen, V.; Edelstein-Keshet, L. (2006). Polarization and movement of keratocytes: A multiscale modelling approach. *Bull. Math. Biol.*, v.68, n.5, p.1169–1211.
- Marques, F. C.; Neves, A. (2014a). Min-max theory and the Willmore conjecture. *Ann. of Math. (2)*, v.179, n.2, p.683–782.
- Marques, F. C.; Neves, A. (2014b). The Willmore conjecture. Preprint, arXiv:1409.7664.
- Massey, B.; Ward-Smith, J. (1998). *Mechanics of fluids*. Taylor & Francis.
- Maude, A. (1957). Action and viscous flow. *Brit. J. Appl. Phys.*, v.8, p.343–344.
- Mayer, U. F.; Simonett, G. (2002). A numerical scheme for axisymmetric solutions of curvature-driven free boundary problems, with applications to the Willmore flow. *Interfaces and Free Boundaries*, v.4, p.89–109.
- Means Jr., R. T.; Glader, B. (2009). Anemia: General considerations. Greer, J. P.; Foerster, J.; Rodgers, G. M.; Paraskevas, F.; Glader, B.; Arber, D. A.; Jr., R. T. M., editores, *Wintrobe's Clinical Hematology*, v. 1, p. 779–809. CRC Press, Philadelphia, USA, 12a. ed.
- Meyer, M.; Desbrun, M.; Schröder, P.; Barr, A. H. (2002). Discrete differential geometry operators for triangulated 2-manifolds. *VisMath*, Berlin, Germany.
- Michie, K. A.; Löwe, J. (2006). Dynamic filaments of the bacterial cytoskeleton. *Ann. Rev. Biochem.*, v.75, p.467–492.
- Müller, M.; Katsov, K.; Schick, M. (2006). Biological and synthetic membranes: What can be learned from a coarse-grained description? *Phys. Rep.*, v.434, n.5-6, p.113–176.
- Nash, J. (1954). C^1 isometric imbeddings. *Ann. Math.*, v.60, p.383–396.

- Neilson, M.; Mackenzie, J.; Webb, S.; Insall, R. (2011). Modeling cell movement and chemotaxis using pseudopod-based feedback. *SIAM J. Sci. Comput.*, v.33, n.3, p.1035–1057.
- Nelson, P. (2014). *Biological Physics: Energy, Information, Life*. W. H. Freeman & Co., New York. (Updated First Edition).
- Nicolson, G. L. (2014). The fluid mosaic model of membrane structure: Still relevant to understanding the structure, function and dynamics of biological membranes after more than 40 years. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes*, v.1838, n.6, p.1451 – 1466. Membrane Structure and Function: Relevance in the Cell's Physiology, Pathology and Therapy.
- Novak, I. L.; Slepchenko, B. M.; Mogilner, A. (2008). Quantitative analysis of g-actin transport in motile cells. *Biophys. J.*, v.95, n.4, p.1627 – 1638.
- Oldroyd, J. G. (1955). The effect of interfacial stabilizing films on the elastic and viscous properties of emulsions. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v.232, n.1191, p.567–577.
- Peng, Z.; Asaro, R. J.; Zhu, Q. (2011). Multiscale modelling of erythrocytes in Stokes flow. *J. Fluid Mech.*, v.686, p.299–337.
- Peng, Z.; Li, X.; Pivkin, I. V.; Dao, M.; Karniadakis, G. E.; Suresh, S. (2013). Lipid bilayer and cytoskeletal interactions in a red blood cell. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.110, n.33, p.13356–13361.
- Poisson, S. D. (1812). *Mémoire sur les Surfaces Élastiques*. Mem. Cl. Sci. Math. Phys. Inst. de France.
- Pontes, B.; Ayala, Y.; Fonseca, A. C. C.; Romão, L. F.; Amaral, R. F.; Salgado, L. T.; Lima, F. R.; Farina, M.; Viana, N. B.; Moura-Neto, V.; Nussenzveig, H. M. (2013). Membrane elastic properties and cell function. *PLoS ONE*, v.8, n.7, p.e67708.
- Popinet, S. (2009). An accurate adaptive solver for surface–tension–driven interfacial flows. *J. Comput. Phys.*, v.228, p.5838–5866.
- Rahimi, M.; Arroyo, M. (2012). Shape dynamics, lipid hydrodynamics, and the complex viscoelasticity of bilayer membranes. *Phys. Rev. E*, v.86, n.1, p.011932.
- Ramakrishnan, N.; Kumar, P. S.; Radhakrishnan, R. (2014). Mesoscale computational studies of membrane bilayer remodeling by curvature-inducing proteins. *Physics Reports*, v.543, n.1, p.1 – 60.
- Rangarajan, R.; Lew, A. J. (2012). Universal meshes: A new paradigm for computing with nonconforming triangulations. Preprint, arXiv:1201.4903.

- Reusken, A. (2008). Analysis of an extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows. *Comput. Visual. Sci.*, v.11, p.293–305.
- Rodrigues, D. S.; Ausas, R. F.; Mut, F.; Buscaglia, G. C. (2014). A semi-implicit finite element method for viscous lipid membranes. Preprint, arXiv:1409.3581.
- Rodrigues, D. S.; Ausas, R. F.; Mut, F.; Buscaglia, G. C. (2015). A semi-implicit finite element method for viscous lipid membranes. *Journal of Computational Physics*, v.298, p.565–584.
- Rodrigues, D. S.; Ruas, V.; Buscaglia, G. C. (2013a). Elemento finito do tipo Zienkiewicz em fluidodinâmica incompressível: avaliação em escoamento transitório através de obstáculo retangular. *Mecânica Computacional*, v. 32, p. 1363–1378.
- Rodrigues, D. S.; Ruas, V.; Buscaglia, G. C. (2013b). Numerical assessment of a Zienkiewicz-type finite element in incompressible fluid dynamics. (resumo). XXXIV Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE).
- Ruas, V. (2013). Hermite finite elements for second order boundary value problems with sharp gradient discontinuities. *J. Comput. Appl. Math.*, v.246, n.0, p.234 – 242. Fifth International Conference on Advanced Computational Methods in Engineering (ACOMEN 2011).
- Rubinstein, B.; Fournier, M. F.; Jacobson, K.; Verkhovsky, A. B.; Mogilner, A. (2009). Actin-myosin viscoelastic flow in the keratocyte lamellipod. *Biophys. J.*, v.97, n.7, p.1853 – 1863.
- Rubinstein, B.; Jacobson, K.; Mogilner, A. (2005). Multiscale two-dimensional modeling of a motile simple-shaped cell. *Multiscale Model. Simul.*, v.3, n.2, p.413–439.
- Rusu, R. (2005). An algorithm for the elastic flow of surfaces. *Interf. Free Bound.*, v.7, p.229–239.
- Saffman, P.; Delbrück, M. (1975). Brownian motion in biological membranes. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.72, p.3111–3113.
- Salac, D.; Miksis, M. (2011). A level set projection model of lipid vesicles in general flows. *J. Comput. Phys.*, v.230, n.22, p.8192–8215.
- Sampaio, J. C. V. (2008). *Uma introdução a topologia geométrica*. EDUFSCar, São Carlos.
- Santos, N. C.; Castanho, M. A. R. B. (2002). Lipossomas: a bala mágica acertou? *Quím. Nova*, v.25, n.6, p.1181–1185.
- Scriven, L. (1960). Dynamics of a fluid interface: Equations of motion for Newtonian surface fluids. *Chem. Eng. Sci.*, v.12, p.98–108.

- Seguin, B.; Fried, E. (2014). Microphysical derivation of the Canham-Helfrich free-energy density. *J. Math. Biol.*, v.68, n.3, p.647–665.
- Seifert, U. (1997). Configurations of fluid membranes and vesicles. *Adv. Phys.*, v.46, p.13–137.
- Sessa, G.; Weissmann, G. (1968). Phospholipid spherules (liposomes) as a model for biological membranes. *J. Lipid Res.*, v.9, n.3, p.310–318.
- Shao, D.; Levine, H.; Rappel, W.-J. (2012). Coupling actin flow, adhesion, and morphology in a computational cell motility model. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.109, n.18, p.6851–6856.
- Shao, D.; Rappel, W.-J.; Levine, H. (2010). Computational model for cell morphodynamics. *Phys. Rev. Lett.*, v.105, n.10, p.108104.
- Shih, A. Y.; Freddolino, P. L.; Arkhipov, A.; Sligar, S. G.; Schulten, K. (2008). Chapter 11 molecular modeling of the structural properties and formation of high-density lipoprotein particles. Feller, S. E., editor, *Computational Modeling of Membrane Bilayers*, v. 60 de *Current Topics in Membranes*, p. 313 – 342. Academic Press Inc.
- Singer, S. J. (1971). The molecular organization of biological membranes. Rothfield, L. I., editor, *Structure and Function of Biological Membranes*, p. 146–223. Academic Press Inc., New York.
- Singer, S. J.; Nicolson, G. L. (1972). The fluid mosaic model of the structure of cell membranes. *Science*, v.175, n.4023, p.720–731.
- Skar-Gislinge, N.; Simonsen, J. B.; Mortensen, K.; Feidenhans'l, R.; Sligar, S. G.; Lindberg Møller, B.; Bjørnholm, T.; Arleth, L. (2010). Elliptical structure of phospholipid bilayer nanodiscs encapsulated by scaffold proteins: Casting the roles of the lipids and the protein. *J. Amer. Chem. Soc.*, v.132, n.39, p.13713–13722.
- Smith, A. S.; Sackmann, E.; Seifert, U. (2004). Pulling tethers from adhered vesicles. *Phys. Rev. Lett.*, v.92, p.208101.
- Staykova, M.; Arroyo, M.; Rahimi, M.; Stone, H. (2013). Confined bilayers passively regulate shape and stress. *Phys. Rev. Lett.*, v.110, p.028101.
- Staykova, M.; Holmes, D. P.; Read, C.; Stone, H. A. (2011). Mechanics of surface area regulation in cells examined with confined lipid membranes. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v.108, n.22, p.9084–9088.
- Stéphanou, A.; Mylona, E.; Chaplain, M.; Tracqui, P. (2008). A computational model of cell migration coupling the growth of focal adhesions with oscillatory cell protrusions. *J. Theor. Biol.*, v.253, n.4, p.701 – 716.

- Sullivan, J. (2008). Curvatures of smooth and discrete surfaces. Bobenko, A. I.; Sullivan, J. M.; Schröder, P.; Ziegler, G. M., editores, *Discrete Differential Geometry*, v. 38 de *Oberwolfach Seminars*, p. 175–188. Birkhäuser Basel.
- Tasso, I. V. M.; Buscaglia, G. C. (2013). A finite element method for viscous membranes. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.255, p.226–237.
- Tasso, I. V. M.; Rodrigues, D. S.; Buscaglia, G. C. (2011). Assessment of curvature approximation methods in the simulation of viscous biological membranes. *Congresso de Matemática Aplicada*, p. 551–554, Uberlândia.
- Tezduyar, T.; Mittal, S.; Ray, S. E.; Shih, R. (1992). Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v.95, n.2, p.221–242.
- Toponogov, V. A. (2006). *Differential geometry of curves and surfaces: A concise guide*. Birkhäuser, Boston.
- Torchilin, V. P. (2005). Recent advances with liposomes as a pharmaceutical carriers. *Nature Rev.*, v.4, p.145–160.
- Turgeon, M. L. (2011). *Clinical Hematology: Theory and Procedures*. Lippincott Williams & Wilkins, fiftha. ed.
- Udroiu, I. (2014). Estimation of erythrocyte surface area in mammals. Preprint, arXiv:1403.7660.
- Vanderlei, B.; Feng, J.; Edelstein-Keshet, L. (2011). A computational model of cell polarization and motility coupling mechanics and biochemistry. *Multiscale Model. Simul.*, v.9, n.4, p.1420–1443.
- Veerapaneni, S. K.; Raj, R.; Biros, G.; Purohit, P. (2009). Analytical and numerical solutions for shapes of quiescent two-dimensional vesicles. *Int. J. Non-Linear Mech.*, v.44, n.3, p.257–262.
- Verfürth, R. (1984). Error estimates for a mixed finite element approximation of the Stokes problem. *RAIRO Anal. Numer.*, v.18, p.175–182.
- Vriezema, D. M.; Kros, A.; de Gelder, R.; Cornelissen, J. J. L. M.; Rowan, A. E.; Nolte, R. J. M. (2004). Electroformed giant vesicles from thiophene-containing rod-coil diblock copolymers. *Macromolecules*, v.37, p.4736–4739.
- Watson, J. D.; Crick, F. H. (1953). Molecular structure of nucleic acids; a structure for deoxyribose nucleic acid. *Nature*, v.171, n.4356, p.737–738.

- Waugh, R. (1982a). Surface viscosity measurements from large bilayer vesicle tether formation I: analysis. *Biophys. J.*, v.38, p.19–27.
- Waugh, R. (1982b). Surface viscosity measurements from large bilayer vesicle tether formation II: experiments. *Biophys. J.*, v.38, p.28–37.
- Weiss, T. F. (1996). *Cellular Biophysics, Volume 1: Transport*. The MIT Press, Cambridge.
- White, J. H. (1973). A global invariant of conformal mappings in space. *Proc. Amer. Math. Soc.*, v.38, n.1, p.162–164.
- Willmore, T. J. (1965). Note on embedded surfaces. *An. Ști. Univ. "Al. I. Cuza" Iași Secț. I a Mat.*, v.11B, p.493–496.
- Willmore, T. J. (1993). *Riemannian Geometry*. Clarendon Press, Oxford.
- Wolgemuth, C. W.; Stajic, J.; Mogilner, A. (2010). Redundant mechanisms for stable cell locomotion revealed by minimal models. *Biophys. J.*, v.98, n.3, Supplement 1, p.160a – 161a.
- Wolgemuth, C. W.; Zajac, M. (2010). The moving boundary node method: A level set-based, finite volume algorithm with applications to cell motility. *J. Comput. Phys.*, v.229, n.19, p.7287 – 7308.
- Zienkiewicz, O. C.; Taylor, R. L. (2000). *The Finite Element Method: Solid Mechanics, Vol. 2, 5th. ed.* Butterworth, Heinemann, London.