



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE INFORMÁTICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

Rita de Cássia Jerônimo da Silva

**Simulação da Adesão Bacteriana a uma Superfície Rugosa Baseada na  
Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH)**

Recife

2025

Rita de Cássia Jerônimo da Silva

**Simulação da Adesão Bacteriana a uma Superfície Rugosa Baseada na  
Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH)**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Ciência da Computação.

**Área de Concentração:** Teoria da Computação

**Orientador:** Prof. Dr. Silvio de Barros Melo

Recife

2025

.Catalogação de Publicação na Fonte. UFPE - Biblioteca Central

Silva, Rita de Cássia Jerônimo da.

Simulação da adesão bacteriana a uma superfície rugosa baseada na Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH) / Rita de Cássia Jerônimo da Silva. - Recife, 2025.

155f.: il.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Informática, Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação, 2025.

Orientação: Silvio de Barros Melo.

Inclui referências.

1. Adesão Bacteriana; 2. Biofilmes; 3. Staphylococcus aureus; 4. Rugosidade; 5. Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH); 6. Acoplamento Rígido-Fluido. I. Melo, Silvio de Barros. II. Título.

UFPE-Biblioteca Central

**Rita de Cássia Jerônimo da Silva**

**“Simulação da Adesão Bacteriana a uma Superfície Rugosa Baseada na Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH)”**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Ciência da Computação. Área de Concentração: Teoria da Computação.

Aprovada em: 27/02/2025.

---

**Orientador: Prof. Dr. Silvio de Barros Melo**

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. Nivan Roberto Ferreira Junior  
Centro de Informática/UFPE

---

Prof. Dr. Hilário Jorge Bezerra de Lima Filho  
Depto. de Engenharia Química / UNICAP

---

Prof. Dra. Glageane da Silva Souza  
Unidade Acadêmica de Física e  
Matemática/UFCEG

---

Prof. Dr. Sérgio de Carvalho Bezerra  
Departamento de Computação Científica/UFPB

---

Prof. Dr. João Marcelo Xavier Natario Teixeira  
Depto. de Eletrônica e Sistemas / UFPE

---

Prof. Dr. Marco José da Silva  
Depto. de Mecatrônica / Johannes Kepler /  
Universitat Linz

Dedico esta obra aos meus pais, Antônio e Maria, bênçãos de Deus que sempre me carregaram e sustentaram com fé, oração e amor incondicional em cada etapa da minha vida.

## AGRADECIMENTOS

A Deus, Criador e fonte inesgotável de misericórdia, por me conceder força, fé e perseverança para superar os desafios e alcançar meus objetivos.

À minha família, especialmente aos meus pais e à minha irmã, pelo amor incondicional, apoio constante e carinho que me acompanharam em cada passo desta jornada.

Ao meu orientador, Professor Silvio de Barros Melo, pela dedicação, paciência, amizade e companheirismo. Sua orientação precisa, generosidade e compreensão foram fundamentais para o sucesso deste trabalho, sendo uma base sólida em todas as etapas do processo.

Aos professores que, ao longo da minha formação acadêmica, compartilharam seus conhecimentos e experiências, contribuindo decisivamente para meu desenvolvimento pessoal e profissional.

Aos amigos, em especial aos membros do grupo de pesquisa CORE, com destaque para Daniel, cuja lealdade, apoio e companheirismo foram essenciais, estando sempre ao meu lado nos momentos mais desafiadores.

À CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), pelo apoio financeiro que possibilitou a continuidade dos estudos, e à Universidade Federal de Pernambuco, especialmente à Coordenação do Programa de Pós-Graduação Acadêmico em Ciência da Computação do Centro de Informática, pela oportunidade e excelência na formação acadêmica oferecida.

A todos que, de alguma forma, contribuíram para minha trajetória — seja com suporte técnico, emocional ou colaborativo — deixo aqui meu sincero e profundo agradecimento.

## RESUMO

A adesão bacteriana a superfícies rugosas desempenha um papel essencial na formação de biofilmes, impactando a saúde, a indústria e o meio ambiente. Nesta tese, foi desenvolvido um modelo numérico inovador que combinou o método da Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH) com o potencial de Lennard-Jones (LJ) para investigar os mecanismos iniciais de adesão de bactérias individuais rígidas a superfícies rugosas. Implementado no framework Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas baseada em Python (PySPH), o modelo permitiu simular interações intermoleculares e hidrodinâmicas, superando limitações de teorias tradicionais, como as teorias termodinâmica, Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO), DLVO Estendida (XDLVO), o método da Aproximação de Derjaguin (DA) e o método de Integração de Elementos de Superfície (SEI). Dados experimentais obtidos por Microscopia de Força de Cisalhamento (ShFM) e estudos prévios sobre a adesão da bactéria *Staphylococcus aureus* foram utilizados para analisar o impacto da rugosidade do substrato. Comparações com resultados da literatura, baseados em Dinâmica Molecular (MD), demonstraram a precisão e a consistência do modelo proposto. Esta pesquisa estabeleceu uma base para o desenvolvimento de modelos mais abrangentes, capazes de incorporar propriedades adicionais de bactérias e contribuir para o controle de biofilmes em aplicações práticas.

**Palavras-chaves:** Adesão Bacteriana. Biofilmes. *Staphylococcus aureus*. Rugosidade. Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH). Acoplamento Rígido-Fluido.

## ABSTRACT

Bacterial adhesion to rough surfaces plays a key role in biofilm formation, impacting health, industry, and the environment. In this thesis, an innovative numerical model was developed by combining the Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method with the Lennard-Jones (LJ) potential to investigate the initial mechanisms of adhesion of individual rigid bacteria to rough surfaces. Implemented within the Python-based Smoothed Particle Hydrodynamics (PySPH) framework, the model enabled the simulation of both intermolecular and hydrodynamic interactions, overcoming limitations of traditional theories such as thermodynamic, Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO), Extended DLVO (XDLVO), Derjaguin approximation method (DA), and Surface element integration method (SEI). Experimental data obtained through Shear Force Microscopy (ShFM) and previous studies on the adhesion of *Staphylococcus aureus* were used to analyze the impact of substrate roughness. Comparisons with results from the literature based on Molecular Dynamics (MD) demonstrated the accuracy and consistency of the proposed model. This research provides a foundation for the development of more comprehensive models capable of incorporating additional bacterial properties and contributing to the control of biofilms in practical applications.

**Keywords:** Bacterial Adhesion. Biofilms. *Staphylococcus aureus*. Roughness. Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH). Rigid-Fluid Coupling.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – UTI para pacientes com coronavírus no hospital Gilberto Novaes, em Manaus (AM). . . . .	18
Figura 2 – Biofilmes em ambientes naturais. . . . .	26
Figura 3 – Biofilmes na indústria alimentícia. . . . .	26
Figura 4 – Biofilmes em ambientes hospitalares. . . . .	27
Figura 5 – Bactérias planctônicas em fluido buscando superfície para adesão. . . . .	30
Figura 6 – Bactérias fixas em superfície formando microcolônia e reproduzindo-se. . . . .	32
Figura 7 – Organismos dispersam-se do biofilme para formar novas comunidades. . . . .	33
Figura 8 – Variação de $\Delta G^{adh}$ em função de $\gamma_{BS}$ com $\gamma_{BL} = 30$ e $\gamma_{SL} = 40$ . . . . .	35
Figura 9 – Curva do potencial DLVO $\Delta G^{adh}(h)$ em função da distância $h$ . . . . .	37
Figura 10 – Curvas teóricas das energias de interação segundo a teoria XDLVO, com parâmetros ajustados. . . . .	39
Figura 11 – Energia de interação esfera-plano (representação esquemática). . . . .	40
Figura 12 – Energia de interação esfera-plano (representação esquemática). . . . .	42
Figura 13 – Energia de interação esfera-plano por SEI. . . . .	44
Figura 14 – Energia de interação esfera-plano calculada por SEI. . . . .	45
Figura 15 – Bactéria aderida a superfície lisa e nanoestruturada (dados reais de AFM). . . . .	47
Figura 16 – Diferença de comportamento entre sólido e fluido sob a influência da força de cisalhamento $F$ . . . . .	51
Figura 17 – Função núcleo de suavização SPH tridimensional (esquemática). . . . .	70
Figura 18 – Cepas de <i>Staphylococcus aureus</i> . . . . .	88
Figura 19 – Diagrama comparando as abordagens baseadas em DLVO e SPH. . . . .	89
Figura 20 – Curva do potencial de Lennard-Jones $U(r)$ em função da distância $r$ . . . . .	90
Figura 21 – Curva da força $F(r)$ derivada do potencial de Lennard-Jones em função da distância $r$ . . . . .	91
Figura 22 – Gráfico da função kernel spline cúbica com $\sigma_3 = 1$ , em função da variável adimensional $q = \frac{x}{h}$ . . . . .	95
Figura 23 – Gráfico da função kernel $W_{ij}(h)$ em função da distância $x_{ij}$ , com $\sigma_3 = 1$ e $h = 1$ . . . . .	97

Figura 24 – Gráfico da curva da pressão em função da densidade usando a equação de equação de Estado de Tait com Correção de Hughes e Graham (Tait-HG) ( $c = 1500m/s, \gamma = 7, \rho_0 = 1000kg/m^3$ ). . . . .	98
Figura 25 – Comparação das velocidades das partículas com e sem a aplicação da correção XSPH. . . . .	100
Figura 26 – Variação da densidade ao longo da distância da superfície, com e sem a correção de densidade. . . . .	106
Figura 27 – Exemplo de amostra de superfície aleatória. . . . .	117
Figura 28 – Distribuição das forças máximas de adesão local para 45 simulações (em nN). . . . .	118
Figura 29 – Distribuição das forças locais máximas para as 200 simulações (em nN). . . . .	119
Figura 30 – Distribuição das forças totais de adesão sobre a bactéria nos 200 cenários simulados (nN). . . . .	120
Figura 31 – Representações da bactéria e da superfície para o caso com um único ponto de contato: a) Bactéria e superfície; b) Detalhe rotacionado da bactéria. . . . .	120
Figura 32 – Representações da bactéria e da superfície para o caso com múltiplas áreas de contato; a) Bactéria e superfície; b) Detalhe rotacionado da bactéria; c) Áreas de contato na superfície destacadas. . . . .	121
Figura 33 – Distribuição das forças totais de adesão agrupadas pelas forças máximas atuando na superfície da bactéria nos 200 cenários simulados (em nN). . . . .	122
Figura 34 – Representação da bactéria e da superfície <i>LIPSS</i> para o caso com um único ponto de contato. . . . .	123
Figura 35 – Distribuição das forças locais máximas para as 200 simulações (em nN), correspondente à superfície <i>LIPSS</i> . . . . .	123
Figura 36 – Distribuição das forças totais de adesão sobre a bactéria nos 200 cenários simulados correspondentes à superfície <i>LIPSS</i> . . . . .	124
Figura 37 – Representação da bactéria e da superfície <i>NP</i> para o caso com um único ponto de contato. . . . .	125
Figura 38 – Distribuição das forças locais máximas para as 200 simulações (em nN), correspondente à superfície <i>NP</i> . . . . .	125
Figura 39 – Distribuição das forças totais de adesão sobre a bactéria nos 200 cenários simulados correspondentes à superfície <i>NP</i> . . . . .	126

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<b>AFM</b>	Microscopia de Força Atômica
<b>CFD</b>	Dinâmica de Fluidos Computacional
<b>CFL</b>	Condição Courant-Friedrichs-Lewy
<b>COVID-19</b>	doença causada pelo Coronavírus ou, mais precisamente, vírus SARS-CoV-2
<b>CPU</b>	Central Processing Unit
<b>DA</b>	Aproximação de Derjaguin
<b>DEM</b>	método de Elemento Difuso
<b>DLVO</b>	Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek
<b>DNA</b>	ácido desoxirribonucleico
<b>DNS</b>	Simulação Numérica Direta
<b>DPD</b>	Dinâmica de Partículas Dissipativas
<b>DSEM</b>	método de Elemento Discreto
<b>DSMC</b>	Simulação Direta Monte Carlo
<b>EDO</b>	Equações Diferenciais Ordinárias
<b>EDP</b>	Equações Diferenciais Parciais
<b>EFGM</b>	método de Galerkin Livre de Elementos
<b>EPEC</b>	Avaliar-Predizer-Avaliar-Corrigir
<b>EPS</b>	substâncias poliméricas extracelulares
<b>ESPreSO</b>	Extensible Simulation Package for Research on Soft Matter
<b>FDM</b>	método das Diferenças Finitas
<b>FEM</b>	método de Elementos Finitos
<b>FLIP</b>	Partícula Implícita de Fluido
<b>FPM</b>	método do Ponto Finito
<b>FSI</b>	Interações Fluido-Estrutura

<b>FVM</b>	método dos Volumes Finitos
<b>GFD</b>	Diferenças Finitas Generalizado
<b>GPU</b>	Graphics Processing Unit
<b>IB</b>	Immersed Boundary
<b>IEFG</b>	método de Galerkin sem Elementos
<b>IMLS</b>	Interpolação de Mínimos Quadrados Móveis
<b>ISPH</b>	método SPH Incompressível
<b>KDF</b>	função de Densidade Sem Derivadas do Kernel
<b>LB</b>	Lattice Boltzmann
<b>LBIE</b>	equação Integral de Contorno Local
<b>LGA</b>	Autômatos de Gás de Rede
<b>LJ</b>	potencial de Lennard-Jones
<b>MD</b>	Dinâmica Molecular
<b>MFEM</b>	método dos Elementos Finitos sem Malha
<b>MHD</b>	Magnetohidrodinâmica
<b>MLPG</b>	método de Petrov-Galerkin Local sem Malha
<b>MLSM</b>	Mínimos Quadrados Móveis
<b>MPM</b>	métodos de Partículas Sem Malha
<b>MPS</b>	método Semi-implícito de Partículas Móveis
<b>MRSA</b>	Methicillin-Resistant <i>Staphylococcus aureus</i>
<b>MWS</b>	Forma Fraca-Forte Livre de Malha
<b>NEM</b>	método do Elemento Natural
<b>NNGM</b>	método do Vizinho Natural de Galerkin
<b>NNRPIM</b>	método da Interpolação de Ponto Radial Vizinho Natural
<b>NREM</b>	método dos Elementos Radiais Naturais
<b>PAM</b>	método de Pontos
<b>PEC</b>	Prever-Avaliar-Corrigir

<b>PIC</b>	Partícula na Célula
<b>PIM</b>	método de Interpolação de Pontos
<b>PST</b>	Técnicas de Deslocamento de Partículas
<b>PUFEM</b>	método de Partição de Elementos Finitos Unitários
<b>PySPH</b>	Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas baseada em Python
<b>RBF</b>	função de Base Radial
<b>RK2</b>	Runge-Kutta de Segunda Ordem
<b>RKPM</b>	método de Partícula Kernel Reproduzido
<b>RNA</b>	ácido ribonucleico
<b>RPIM</b>	método de Interpolação de Ponto Radial sem Malha
<b>SEI</b>	método de Integração de Elementos de Superfície
<b>ShFM</b>	Microscopia de Força de Cisalhamento
<b>SHRPIM</b>	método da Interpolação de Ponto Radial de Hermite Suavizada
<b>SHTC-SPH</b>	método SPH Compatível Termodinamicamente Hiperbólico Simétrico
<b>SPH</b>	Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas
<b>Tait-HG</b>	equação de Estado de Tait com Correção de Hughes e Graham
<b>TVF</b>	Formulação da Velocidade de Transporte
<b>WCSPH</b>	SPH Fracamente Compressível
<b>WENO</b>	Esquema Não-Oscilatório Essencialmente Ponderado
<b>XDLVO</b>	DLVO Estendida
<b>XSPH</b>	SPH Estendido

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>17</b>
1.1	MOTIVAÇÃO	18
1.2	OBJETIVOS	23
<b>1.2.1</b>	<b>Objetivo Geral</b>	<b>23</b>
<b>1.2.2</b>	<b>Objetivos Específicos</b>	<b>23</b>
<b>2</b>	<b>ADESÃO BACTERIANA E FORMAÇÃO DE BIOFILMES</b>	<b>25</b>
2.1	INTRODUÇÃO	25
2.2	BIOFILMES	25
2.3	ADESÃO BACTERIANA: DO ESTADO PLANCTÔNICO AO BIOFILME	29
<b>2.3.1</b>	<b>Adesão Reversível</b>	<b>30</b>
<b>2.3.2</b>	<b>Adesão Irreversível</b>	<b>31</b>
<b>2.3.3</b>	<b>Formação de Biofilmes Bacterianos</b>	<b>32</b>
2.4	TEORIAS DA ADESÃO BACTERIANA	33
<b>2.4.1</b>	<b>Teoria Termodinâmica</b>	<b>34</b>
<b>2.4.2</b>	<b>Teoria DLVO</b>	<b>35</b>
<b>2.4.3</b>	<b>Teoria XDLVO</b>	<b>38</b>
<b>2.4.4</b>	<b>Método da Aproximação de Derjaguin (DA)</b>	<b>40</b>
<b>2.4.5</b>	<b>Método Integração de Elementos de Superfície (SEI)</b>	<b>42</b>
<i>2.4.5.1</i>	<i>Algumas Limitações das Teorias da Adesão Bacteriana</i>	<i>45</i>
2.5	FATORES QUE INFLUENCIAM A ADESÃO BACTERIANA EM MEIOS AQUOSOS	46
<b>2.5.1</b>	<b>Impacto da Rugosidade Superficial na Adesão Bacteriana</b>	<b>47</b>
<b>3</b>	<b>FLUIDOS</b>	<b>50</b>
3.1	INTRODUÇÃO	50
3.2	FLUIDOS	50
<b>3.2.1</b>	<b>Tensão de Cisalhamento</b>	<b>50</b>
<b>3.2.2</b>	<b>Hipótese do Contínuo</b>	<b>52</b>
<b>3.2.3</b>	<b>Algumas Propriedades dos Fluidos</b>	<b>52</b>
<i>3.2.3.1</i>	<i>Densidade ou Massa Específica</i>	<i>52</i>
<i>3.2.3.2</i>	<i>Viscosidade</i>	<i>52</i>

3.2.3.3	<i>Pressão</i> . . . . .	53
3.2.3.4	<i>Compressibilidade</i> . . . . .	54
3.2.3.5	<i>Tensão Superficial</i> . . . . .	54
<b>3.2.4</b>	<b>Classificação dos Fluidos</b> . . . . .	<b>54</b>
3.2.4.1	<i>Com Base na Viscosidade</i> . . . . .	54
3.2.4.2	<i>Com base na Compressibilidade</i> . . . . .	55
3.2.4.3	<i>Com Base na Presença de Sólidos Suspensos</i> . . . . .	56
3.3	MECÂNICA DOS FLUIDOS . . . . .	57
<b>3.3.1</b>	<b>Tipos de Escoamentos</b> . . . . .	<b>57</b>
3.3.1.1	<i>Escoamentos Viscosos e Não Viscosos</i> . . . . .	57
3.3.1.2	<i>Escoamentos Laminares, Turbulentos e Transitórios</i> . . . . .	58
3.3.1.3	<i>Escoamentos Incompressíveis, Compressíveis e Fracamente Compressíveis</i> . . . . .	58
3.3.1.4	<i>Escoamentos Uni, Bi e Tridimensionais</i> . . . . .	59
<b>3.3.2</b>	<b>Condições de Contorno</b> . . . . .	<b>59</b>
<b>3.3.3</b>	<b>Leis Básicas</b> . . . . .	<b>60</b>
<b>3.3.4</b>	<b>Sistema e Volume de Controle</b> . . . . .	<b>60</b>
3.3.4.1	<i>Abordagens Lagrangiana e Euleriana</i> . . . . .	61
3.3.4.1.1	<b>Abordagem Euleriana</b> . . . . .	<b>61</b>
3.3.4.1.2	<b>Abordagem Lagrangiana</b> . . . . .	<b>61</b>
<b>4</b>	<b>MÉTODO DA HIDRODINÂMICA DE PARTÍCULAS SUAVIZADAS (SPH)</b> . . . . .	<b>62</b>
4.1	INTRODUÇÃO . . . . .	62
4.2	MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL . . . . .	62
4.2.1	<b>Simulação Numérica Computacional</b> . . . . .	<b>62</b>
4.2.2	<b>Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)</b> . . . . .	<b>63</b>
4.2.2.1	<i>Métodos Numéricos</i> . . . . .	63
4.2.2.1.1	<b>Métodos com Malha</b> . . . . .	<b>63</b>
4.2.2.1.2	<b>Métodos sem Malha</b> . . . . .	<b>64</b>
4.2.2.1.3	<b>Métodos de Partículas sem Malha (MPM)'s</b> . . . . .	<b>64</b>
4.3	HIDRODINÂMICA DE PARTÍCULAS SUAVIZADAS (SPH) . . . . .	65
4.3.1	<b>Formulação Básica</b> . . . . .	<b>66</b>
4.3.1.1	<i>Aproximação Kernel</i> . . . . .	66
4.3.1.1.1	<b>Funções Kernel de Suavização</b> . . . . .	<b>67</b>

4.3.1.1.2	<b>Erros da Aproximação Kernel</b>	68
4.3.1.2	Aproximação por Partículas	69
4.3.1.3	Equações Governantes	71
4.3.1.3.1	<b>Equação da Continuidade</b>	71
4.3.1.3.2	<b>Equação do Momento</b>	72
5	<b>ESTADO DA ARTE</b>	74
5.1	INTRODUÇÃO	74
5.2	ADESÃO BACTERIANA: HISTÓRICO, AVANÇOS E TENDÊNCIAS	74
5.2.1	<b>Histórico da Relação entre Adesão Bacteriana e Rugosidade</b>	76
5.3	TEORIAS E AVANÇOS NA COMPREENSÃO DO PROCESSO DE ADE- SÃO BACTERIANA	77
5.4	EVOLUÇÃO DA DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL: UMA REVISÃO	78
5.4.1	<b>Avanços em Métodos sem Malha</b>	80
5.4.2	<b>Uma Visão Geral sobre Métodos de Partículas</b>	82
5.4.3	<b>Evolução do Método SPH</b>	83
6	<b>METODOLOGIA</b>	87
6.1	INTRODUÇÃO	87
6.2	DESCRIÇÃO DO MODELO NUMÉRICO	87
6.2.1	<b>Interação Bactéria e Superfície</b>	89
6.2.1.1	<i>Pseudocódigo da Interação Bactéria e Superfície</i>	92
6.2.2	<b>Interação Superfície e Fluido</b>	93
6.2.2.1	<i>Função Kernel: Spline Cúbica</i>	94
6.2.2.2	<i>Cálculo da Densidade por Soma</i>	95
6.2.2.3	<i>Cálculo da Pressão pela Equação de Estado</i>	97
6.2.2.4	<i>Correção de Velocidade: XSPH</i>	99
6.2.2.5	<i>Esquema de Integração Temporal</i>	100
6.2.2.6	<i>Cálculo Adaptativo do Passo de Tempo</i>	101
6.2.2.7	<i>Condições Iniciais e de Contorno</i>	102
6.2.2.8	<i>Pseudocódigo da Interação Superfície e Fluido</i>	103
6.2.3	<b>Interação Bactéria e Fluido</b>	104
6.2.3.1	<i>Correção da Densidade pela Soma</i>	105
6.2.3.2	<i>Força de Pressão entre Fronteira e Fluido</i>	106

6.2.3.3	<i>Momentos de Força ou Torques</i>	107
6.2.3.4	<i>Força Aplicada ao Corpo Rígido</i>	108
6.2.3.5	<i>Colisão entre Corpos Rígidos</i>	109
6.2.3.6	<i>Movimento de um Corpo Rígido</i>	111
6.2.3.7	<i>Cálculo do Passo de Corpo Rígido Utilizando o Método Runge-Kutta de Segunda Ordem (RK2)</i>	112
6.2.3.8	<i>Cálculo do Passo de Tempo para a Interação Rígido-Fluido no SPH</i>	114
6.2.3.9	<i>Pseudocódigo da Interação Bactéria e Fluido</i>	114
<b>7</b>	<b>MODELAGEM</b>	<b>116</b>
7.1	INTRODUÇÃO	116
7.2	CENÁRIO	116
7.3	RESULTADOS E DISCUSSÕES	117
<b>7.3.1</b>	<b>Resultados para superfícies <i>SPIKES</i></b>	<b>117</b>
<b>7.3.2</b>	<b>Resultados para superfícies <i>LIPSS</i> e <i>NP</i></b>	<b>122</b>
7.4	PSEUDOCÓDIGO DA INTERAÇÃO BACTÉRIA, FLUIDO E SUPERFÍCIE	128
7.5	CONSIDERAÇÕES SOBRE A IMPLEMENTAÇÃO EM GPU	129
7.6	CONCLUSÃO	129
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>133</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Os biofilmes são comunidades organizadas de microrganismos aderidos a superfícies, geralmente envoltos por uma matriz de substâncias poliméricas extracelulares (EPS), produzida pelos próprios microrganismos, pelo ambiente ou pelas células da superfície colonizada (HEYDORN et al., 2000). Essa matriz confere ao biofilme proteção e estabilidade, favorecendo sua persistência em diferentes ambientes (VU et al., 2009).

A formação dos biofilmes é um processo dinâmico e multifásico, que se inicia pela adesão bacteriana (HORI; MATSUMOTO, 2010). Embora teorias clássicas ofereçam uma base para a compreensão desse fenômeno, elas ainda apresentam limitações por não representarem com precisão as condições reais do processo (BOS; MEI; BUSSCHER, 1999).

Com o avanço da modelagem computacional, diversos métodos numéricos têm sido empregados para investigar o processo de adesão bacteriana. Entre as técnicas utilizadas, alguns métodos são consagrados para fenômenos hidrodinâmicos e de Interações Fluido-Estrutura (FSI), porém, até o momento, o método da Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH) ainda não foi explorado de forma específica para simular a adesão bacteriana. O SPH é uma técnica lagrangiana sem malhas que se destaca em diversas aplicações por permitir o tratamento natural de interfaces complexas e meios com geometria irregular, além de oferecer alta resolução espacial na representação dos fenômenos envolvidos (MONAGHAN, 1992). Essas características fazem do SPH uma abordagem promissora para modelar a interação entre bactérias e superfícies rugosas.

Nesta tese, investigou-se a adesão inicial de bactérias a superfícies rugosas por meio de um modelo computacional que integra diferentes abordagens numéricas. A interação entre o fluido e a superfície rugosa foi modelada com a formulação SPH Fracamente Compressível (WCSPH), conforme proposta por Monaghan (2005). A interação entre a bactéria rígida e o fluido baseou-se no acoplamento rígido-fluido desenvolvido por Akinci et al. (2012). Por fim, as forças de curto alcance entre bactéria e superfície foram representadas pelo potencial de Lennard-Jones (LJ), conforme apresentado por Wang et al. (2020).

Parte dos resultados obtidos nesta pesquisa foi divulgada previamente em Silva et al. (2025), no qual é apresentado, até onde se tem conhecimento, o primeiro modelo baseado em SPH a integrar a rugosidade de superfícies, fluido e célula bacteriana rígida em um único sistema. Adicionalmente, os conhecimentos adquiridos durante o desenvolvimento desta tese

também contribuíram para o artigo Silva et al. (2023), que aborda a modelagem computacional de geometrias complexas com alta precisão — um desafio comum tanto na área de manufatura aditiva quanto na simulação de fenômenos envolvendo geometrias irregulares.

Com esta investigação, busca-se contribuir para o entendimento dos mecanismos iniciais de adesão bacteriana a superfícies rugosas, fornecendo subsídios para o desenvolvimento de estratégias mais eficazes de controle e prevenção da formação de biofilmes.

## 1.1 MOTIVAÇÃO

O controle de bactérias resistentes e vírus letais é um desafio global crescente, agravado pela pandemia da doença causada pelo Coronavírus ou, mais precisamente, vírus SARS-CoV-2 (COVID-19) (SONDA et al., 2022) (ver Figura 1). A crise revelou a escassez de terapias antivirais eficazes e os riscos de disseminação de infecções (MOHAMADI; FAZELI, 2022). Em hospitais, a descontaminação de superfícies tornou-se essencial para evitar infecções secundárias por superbactérias, exigindo novas soluções (GRAY; WENZEL, 2020). Espécies bacterianas como *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* e *Pseudomonas aeruginosa* estão ligadas a infecções crônicas graves, com alto impacto na saúde pública e nos custos hospitalares (WU et al., 2018b), (YI et al., 2019).



Figura 1 – UTI para pacientes com coronavírus no hospital Gilberto Novaes, em Manaus (AM).

**Fonte:** (UOL Notícias, 2021)

Neste contexto, esta tese foi motivada pelo projeto “Materiais Autodescontaminantes com Estruturas Hierárquicas Ativo-Passivas”, que combinou nanocompósitos ativos e recobrimen-

---

tos bioinspirados para aumentar a resistência das superfícies à adesão bacteriana (BARRERA et al., 2018), (SANTA-CRUZ et al., 2019). A abordagem envolveu impressão 3D e simulações computacionais para otimizar a topologia das superfícies e prevenir a formação de biofilmes.

A formação de biofilmes representa um dos principais desafios no controle de infecções hospitalares, pois confere proteção às bactérias contra agentes antimicrobianos, tornando os tratamentos menos eficazes (BANERJEE et al., 2023). Essas estruturas podem se formar em superfícies biológicas e não biológicas (MADDI; SCANNAPIECO, 2013), (SPENGLER et al., 2021), mesmo em concentrações bacterianas reduzidas (KHATOON et al., 2018), favorecendo a colonização (HALL-STOODLEY; COSTERTON; STOODLEY, 2004). O processo inicia-se com a adesão celular à superfície, etapa crucial e relativamente independente da rugosidade (SPENGLER et al., 2021), (YANG et al., 2022), sendo a sua interrupção uma estratégia promissora para prevenir a formação de biofilmes (YANG et al., 2022). Compreender as fases desse processo e os efeitos hidrodinâmicos associados é fundamental para o desenvolvimento de soluções mais eficazes (HORI; MATSUMOTO, 2010). Dentre os agentes mais preocupantes, destaca-se a bactéria *Staphylococcus aureus*, especialmente suas cepas resistentes à meticilina (Methicillin-Resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA)), que causam infecções graves e de difícil tratamento (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008), (NANDHINI et al., 2022).

A adesão bacteriana é um processo dinâmico influenciado por fatores físicos, químicos e ambientais, iniciando-se com interações fracas e reversíveis, que podem evoluir para adesão irreversível e colonização (YANG et al., 2022). As propriedades das bactérias e das superfícies, como a rugosidade, afetam diretamente esse processo, podendo tanto favorecer quanto dificultar a adesão, dependendo de suas características (CRAWFORD et al., 2012), (LAZZINI et al., 2021). No entanto, os efeitos da rugosidade ainda são controversos na literatura (MU et al., 2023b), refletindo a complexidade das interações envolvidas. Forças como van der Waals, tensão superficial e efeitos hidrodinâmicos atuam em escala microscópica, dificultando a observação direta e tornando as simulações computacionais ferramentas fundamentais (BOS; MEI; BUSSCHER, 1999), (XAVIER; FOSTER, 2007). Modelos teóricos clássicos, como os baseados na termodinâmica, não representam adequadamente interações de curto alcance nem fatores biológicos, como a matriz de EPS, a motilidade e o *quorum sensing* — um mecanismo de comunicação bacteriana baseado na produção e detecção de sinais químicos que permite a coordenação coletiva do comportamento celular — além de desconsiderarem o impacto do fluxo e da geometria da superfície (TANDOGAN et al., 2017), o que evidencia a necessidade de abordagens híbridas mais avançadas.

Como alternativa às teorias tradicionais, a Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) passou a ser empregada em pesquisas sobre adesão bacteriana por meio de simulações numéricas, funcionando como uma ponte entre a modelagem e a experimentação (BOULBENE et al., 2012), (PADOVA; MOSSA, 2020), (CHINNARAJ et al., 2021). Essa abordagem oferece uma solução econômica e eficiente para investigar regiões inacessíveis experimentalmente. No entanto, destaca-se a importância da calibração dos modelos numéricos com dados experimentais, a fim de proporcionar uma compreensão mais abrangente dos processos envolvidos, como a adesão bacteriana (PADOVA; MOSSA, 2020).

No artigo de Lazzini et al. (2021), o método MD foi combinada com o potencial de LJ para investigar a adesão inicial de bactérias *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*, a superfícies texturizadas onduladas e com nanopilares. As simulações foram conduzidas por meio do modelo *object-in-fluid* do Extensible Simulation Package for Research on Soft Matter (ESPreSO), uma plataforma de simulação desenvolvida para modelar sistemas de matéria mole (WEIK et al., 2019), integrando o método Lattice Boltzmann (LB) para a dinâmica de fluidos e o método Immersed Boundary (IB) para descrever as interações entre a célula bacteriana e o fluido, permitindo a modelagem da superfície da bactéria e sua interação com o ambiente fluido de forma precisa.

Nesse modelo, a célula bacteriana foi representada como um objeto imerso, cuja fronteira foi descrita por uma malha triangular lagrangiana (CIMRÁK; GUSENBAUER; JANČIGOVÁ, 2014). O acoplamento dos métodos foi realizado conforme o procedimento proposto por Ahlrichs e Dünweg (1998), aplicando-se uma força de arrasto  $F_j = \epsilon(v - u)$  à esfera em movimento, em que  $\epsilon$  representa o coeficiente de fricção,  $u$  a velocidade do fluido e  $v$  a velocidade do ponto IB. A interação entre as células próximas foi calculada por interpolação linear dos valores de  $u$ , enquanto a força oposta,  $-F_j$ , foi distribuída entre as células mais próximas da grade (AHLRICH; DÜNWEG, 1998).

A MD demonstrou ser eficaz em simulações em escala atômica; no entanto, apresenta limitações significativas quando aplicada a sistemas macroscópicos, devido ao elevado custo computacional, o que restringe tanto a resolução espacial quanto a temporal (BOPP et al., 2008). Nesse contexto, Ganesh, Patra e Travis (2022) e Islam, Ganesh e Patra (2022) evidenciaram o SPH como uma alternativa promissora. Enquanto Ganesh, Patra e Travis (2022) propuseram a combinação entre a MD e o SPH em um framework multiescala, Islam, Ganesh e Patra (2022) indicaram que o SPH pode, em certos cenários, substituir a MD, desde que adequadamente configurado.

---

O SPH já se mostrou eficaz na modelagem de fenômenos complexos, como a formação de biofilmes e suas interações com o escoamento. Diversos estudos destacaram sua versatilidade em diferentes contextos (SOLEIMANI et al., 2016), (DUPUY; SILK, 2016), (SOLEIMANI, 2017), (FENG et al., 2021), (FENG; NEUWEILER; LIU, 2021), (CARRERA et al., 2022), (FENG; NEUWEILER, 2024). No entanto, a aplicação do SPH para simular a adesão bacteriana a superfícies rugosas ainda não foi explorada, constituindo o foco principal desta tese.

A eficácia do potencial de LJ em simulações de adesão bacteriana é amplamente reconhecida na literatura. Além do modelo desenvolvido por Lazzini et al. (2021), estudos como o de Cheng, Dunn e Brach (2002) utilizaram esse potencial para modelar interações intermoleculares com superfícies rugosas, oferecendo uma base sólida para a compreensão das forças moleculares envolvidas na adesão. De forma semelhante, Dupuy e Silk (2016) enfatizaram a importância das interações iniciais entre bactérias e superfície, em consonância com os princípios físicos adotados neste trabalho.

Nesta tese, foi proposto um modelo para simular a adesão de bactérias rígidas a superfícies rugosas, integrando o SPH ao potencial de LJ. O SPH, uma abordagem lagrangiana livre de malhas (LIU; LIU, 2003), demonstrou grande flexibilidade na modelagem de superfícies complexas e do escoamento ao redor das bactérias, sendo fundamental para compreender a influência do fluido na adesão. Já o potencial de LJ possibilitou a representação precisa das forças intermoleculares, incluindo as interações de van der Waals em superfícies rugosas (ISRAELACHVILI, 2010). A integração dessas duas abordagens conferiu ao modelo escalabilidade e eficiência em simulações multiescala, superando limitações de trabalhos anteriores, como o de Lazzini et al. (2021), e proporcionando uma descrição mais detalhada e realista das interações entre bactérias e superfícies.

O modelo, desenvolvido em escala contínua, simulou a interação entre uma célula bacteriana planctônica — tratada como corpo rígido — e um substrato com superfície rugosa. A escolha da *Staphylococcus aureus* deveu-se à sua forma esférica, natureza Gram-positiva e presença de uma espessa camada de peptidoglicano, características associadas a uma maior resistência a antibióticos por meio de mutações genéticas e mecanismos adaptativos (BAILEY et al., 2014). Essa espécie já havia sido investigada em superfícies nanostruturadas por Lutey et al. (2018), o que reforça sua relevância, especialmente considerando as infecções hospitalares graves causadas por cepas multirresistentes (HUGHES et al., 2024).

A célula bacteriana foi imersa em um fluido computacional representativo de seu ambiente e interagiu com um substrato cuja topologia foi derivada de dados experimentais obtidos por

ShFM (LUTEY et al., 2018). O acoplamento fluido–estrutura foi implementado por meio do SPH, possibilitando interações contínuas e precisas entre o fluido e o corpo rígido, conforme a abordagem proposta por Akinci et al. (2012). A utilização de partículas de fronteira para representar superfícies rígidas evitou descontinuidades espaciais e temporais, garantindo a robustez e a estabilidade das simulações.

Apesar de sua formulação simplificada, o modelo foi capaz de capturar as tendências gerais do processo de adesão, oferecendo uma base sólida para investigações futuras — incluindo a incorporação de forças eletrostáticas e químicas mais complexas. Até onde se tem conhecimento, este foi o primeiro estudo a integrar o SPH ao potencial de LJ para simular a adesão bacteriana em superfícies rugosas, representando um avanço significativo na compreensão inicial desse fenômeno. A abordagem demonstrou grande potencial para elucidar como características microscópicas da superfície e forças intermoleculares influenciam esse processo, abrindo caminho para o desenvolvimento de superfícies antimicrobianas e novas estratégias de controle de biofilmes.

Reconhecem-se, contudo, limitações no modelo proposto. O potencial de LJ não contemplou interações eletrostáticas, químicas ou hidrofóbicas, as quais podem ser determinantes em contextos específicos. A rugosidade do substrato foi representada de forma simplificada, dadas as restrições do SPH na modelagem precisa de superfícies multiescala. Além disso, a célula bacteriana foi modelada como uma esfera rígida, desconsiderando a complexidade estrutural presente nas bactérias reais.

Neste trabalho, tanto a superfície bacteriana quanto o substrato foram tratados como sistemas homogêneos em termos de composição química e propriedades físicas. Ainda que a rugosidade tenha sido incorporada com simplificações, seu papel nas interações com a bactéria pôde ser avaliado. Estudos futuros poderão expandir esse modelo, incorporando heterogeneidades mais realistas na composição do substrato e da superfície bacteriana, de modo a aprimorar a fidelidade e a precisão das simulações.

O objetivo desta tese não foi oferecer uma solução definitiva, mas estabelecer um ponto de partida para o desenvolvimento de modelos mais sofisticados. Espera-se que esta pesquisa contribua para o avanço da compreensão dos mecanismos iniciais da adesão bacteriana e de suas implicações práticas.

---

## 1.2 OBJETIVOS

### 1.2.1 Objetivo Geral

O objetivo geral desta tese consistiu em desenvolver e validar um modelo numérico baseado no método SPH, integrado ao potencial de LJ, para investigar os mecanismos iniciais de adesão de bactérias rígidas a superfícies rugosas, incluindo a influência da rugosidade do substrato e das forças intermoleculares.

### 1.2.2 Objetivos Específicos

1. Analisar as limitações teóricas dos modelos de adesão bacteriana:
  - Revisar criticamente as teorias clássicas — termodinâmica, DLVO, XDLVO, DA e SEI — aplicadas à adesão de bactérias a superfícies, com o intuito de fundamentar o desenvolvimento do modelo.
  - Identificar lacunas nas abordagens atuais para modelar a interação entre bactéria, superfície e fluido.
2. Implementar o modelo SPH com integração do potencial de LJ:
  - Adaptar o método SPH no framework PySPH para representar a bactéria como corpo rígido e modelar o fluido circundante.
  - Implementar e validar o potencial de LJ no PySPH, descrevendo as interações de curto alcance entre bactéria e substrato rugoso.
3. Caracterizar a influência da rugosidade do substrato:
  - Analisar os efeitos da rugosidade sobre os parâmetros de adesão bacteriana, com base em dados de ShFM (LUTEY et al., 2018).
  - Avaliar o impacto das propriedades geométricas e físicas da rugosidade no processo de adesão.
4. Validar o modelo utilizando dados experimentais ou da literatura:
  - Utilizar dados experimentais obtidos por ShFM da bactéria *Staphylococcus aureus*.

- Confrontar os resultados com os obtidos por Lazzini et al. (2021), que combinaram MD e potencial de LJ para simular adesão em superfícies com nanopilares e ondulações.
- Assegurar a consistência entre os resultados simulados e as observações experimentais.

Este modelo estabelece a base inicial para o desenvolvimento de abordagens mais sofisticadas, capazes de incorporar propriedades adicionais das bactérias e ampliar a representatividade das interações em cenários práticos.

## 2 ADESÃO BACTERIANA E FORMAÇÃO DE BIOFILMES

### 2.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta os principais conceitos relacionados à adesão bacteriana e à formação de biofilmes, iniciando pela descrição das fases de adesão: reversível e irreversível. São discutidas as teorias tradicionais — teoria termodinâmica, DLVO e XDLVO — com ênfase em suas abordagens sobre as interações de energia livre, forças de van der Waals, dupla camada elétrica e interações ácido-base (hidrofóbicas e hidrofílicas). Em seguida, são apresentados os métodos DA e SEI, voltados para a análise de interações geométricas e topológicas, mais adequados à modelagem de superfícies complexas. Também são apresentadas as principais limitações de todas essas abordagens. O capítulo é concluído com a análise dos fatores que influenciam a adesão bacteriana em ambientes aquosos, destacando-se o papel da rugosidade das superfícies.

### 2.2 BIOFILMES

De acordo com Vu et al. (2009), um biofilme é uma comunidade organizada de microrganismos — como bactérias, algas, fungos e protozoários — aderida a superfícies e imersa em uma matriz de EPS. Composto por até 90% de água, o biofilme pode apresentar espessura variando entre 50 e 100  $\mu\text{m}$ , a depender da superfície em que se forma (DENG; LV, 2016). Segundo Costerton (1995), os biofilmes originam-se a partir de processos de adesão e agregação de microrganismos, sendo comumente encontrados em ambientes naturais (ver Figura 2), industriais (ver Figura 3) e hospitalares (ver Figura 4).



Figura 2 – Biofilmes em ambientes naturais.

**Fonte:** (SUCITESA, 2025)



Figura 3 – Biofilmes na indústria alimentícia.

**Fonte:** (PORTAL E-FOOD, 2025)



Figura 4 – Biofilmes em ambientes hospitalares.

**Fonte:** (RECOMMED, 2025)

Embora os biofilmes geralmente apresentem impactos negativos, também possuem aplicações benéficas. Na engenharia ambiental, por exemplo, são utilizados em biorreatores para o tratamento de águas residuais e gases, contribuindo para a degradação de poluentes e matéria orgânica, o que favorece a purificação da água de forma eficiente e sustentável (HORI; MATSUMOTO, 2010). Já na biotecnologia, desempenham papel relevante na biorremediação de poluentes ambientais e na produção de bioprodutos (BERNE et al., 2018).

No campo da saúde humana, alguns biofilmes são formados por bactérias probióticas oferecendo proteção contra patógenos, auxiliando na manutenção da saúde intestinal (VARELA-TRINIDAD et al., 2022) e bucal (STAMATOVA; MEURMAN, 2009). No intestino, a microbiota intestinal contribui para a absorção de nutrientes e para o fortalecimento das células intestinais e do sistema imunológico (VARELA-TRINIDAD et al., 2022). Em relação à saúde bucal, os biofilmes formados pela microbiota oral são essenciais para a prevenção da colonização por bactérias patogênicas, promovendo o equilíbrio microbiano da cavidade oral (STAMATOVA; MEURMAN, 2009).

Entretanto, desde sua descoberta em 1674, os biofilmes têm gerado preocupações devido ao seu envolvimento em infecções persistentes (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008). Entre os principais agentes responsáveis pela formação de biofilmes, destacam-se as bactérias, organismos capazes de iniciar a criação dessas estruturas mesmo em concentrações extremamente baixas (KHATOON et al., 2018). Essenciais para a sobrevivência bacteriana, os biofilmes proporcionam um ambiente protegido que aumenta a resistência das bactérias aos antibióticos e ao sistema imunológico (LEMON et al., 2008). Esse fenômeno configurou-se como um dos

---

maiores desafios para a saúde, especialmente no contexto de infecções crônicas associadas a dispositivos médicos, como cateteres, próteses, válvulas cardíacas e implantes, comprometendo a funcionalidade e a segurança dos dispositivos (BARRASA-VILLAR et al., 2017).

Uma vez que a contaminação se inicia pela adesão bacteriana — etapa crucial no desenvolvimento de infecções — os biofilmes formados por bactérias patogênicas favorecem a obtenção de nutrientes, sustentando a sua colonização e a sua reprodução (MORAES et al., 2013), (SPENGLER et al., 2021). Esse processo contribui para a maior persistência e virulência das infecções. Além disso, a matriz de EPS presente nos biofilmes atua como uma barreira física à penetração de antibióticos e à ação do sistema imunológico, tornando essas estruturas altamente resistentes aos tratamentos convencionais (ELBOURNE et al., 2019).

Em ambientes hospitalares, a formação de biofilmes em instrumentos cirúrgicos configura-se como uma preocupação constante, exigindo a adoção de medidas preventivas rigorosas (BARRASA-VILLAR et al., 2017). Na odontologia, o ambiente bucal favorece esse processo, tornando as bactérias mais resistentes e persistentes (TUSON; WEIBEL, 2013). Como consequência, os biofilmes patogênicos contribuem para a formação de placas bacterianas, associadas a cáries, gengivite e periodontite (MADDI; SCANNAPIECO, 2013). Além de comprometerem a saúde bucal, essas infecções aumentam o risco de doenças sistêmicas, como as cardiovasculares e o diabetes.

Adicionalmente, os biofilmes ocasionam problemas significativos, como bioincrustação e corrosão, impondo desafios econômicos consideráveis para a indústria, além de representarem riscos à saúde humana e ao meio ambiente (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008). Na indústria alimentícia, por exemplo, a formação de biofilmes configura-se como um desafio crítico, uma vez que esses se formam em equipamentos de processamento e demonstram resistência aos procedimentos de limpeza e desinfecção, resultando em contaminação alimentar e riscos à saúde dos consumidores (BAGGE-RAVN et al., 2003). Desse modo, a formação de biofilmes em superfícies industriais implica não apenas em prejuízos econômicos expressivos, mas também em preocupações ambientais relevantes.

Com os avanços tecnológicos e os estudos laboratoriais, a compreensão sobre os biofilmes e os mecanismos de adesão bacteriana foram progressivamente aprimorados, mostrando-se essenciais para o desenvolvimento de métodos inovadores voltados ao controle desses organismos (BOULBENE; MORCHAIN; SCHMITZ, 2010).

### 2.3 ADESÃO BACTERIANA: DO ESTADO PLANCTÔNICO AO BIOFILME

As bactérias se apresentam em dois estados principais: o planctônico, no qual permanecem livres em meio líquido, e o sésil, no qual aderem a superfícies e formam biofilmes (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008). Conforme descrito por Elbourne, Crawford e Ivanova (2017), a adesão bacteriana envolve uma transição físico-química do estado planctônico para o sésil. Esse processo revela-se complexo, composto por diversas etapas que resultam em alterações no comportamento e na fisiologia celular. De acordo com Tuson e Weibel (2013), essa transição é mediada por uma combinação de fatores biológicos, químicos e físicos, provenientes tanto das próprias bactérias quanto das superfícies às quais se fixam, incluindo características como estrutura molecular, carga elétrica, hidrofobicidade, composição e rugosidade, além das condições ambientais. Esse mecanismo adaptativo mostra-se essencial para a sobrevivência bacteriana em ambientes hostis, pois permite que as bactérias se ajustem às superfícies e interajam com outros microrganismos.

No estado sésil, as bactérias adquirem diversas vantagens, como maior resistência a antibióticos, melhor acesso a nutrientes e proteção contra predadores (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008), o que favorece sua sobrevivência, especialmente em ambientes adversos. As bactérias colonizam superfícies bióticas ou abióticas, o que impacta diretamente o processo de adesão (LOOSDRECHT et al., 1990a). Esse processo ocorre em duas fases: inicialmente, uma fase reversível, de natureza físico-química, caracterizada por interações de longa distância e baixa especificidade; e, em seguida, uma fase irreversível, de curta distância e de natureza celular, que culmina na formação do biofilme (AN; FRIEDMAN, 2000), (KATSIKOIANNI; MISSIRLIS, 2004).

A proliferação de microrganismos resistentes representa um dos maiores desafios globais nas últimas décadas, principalmente em decorrência do surgimento de novos patógenos que dificultam o tratamento e o controle de infecções (ELBOURNE et al., 2019). Para enfrentar esse desafio, torna-se fundamental compreender os mecanismos iniciais de adesão bacteriana, uma vez que esse conhecimento possibilita o desenvolvimento de estratégias mais eficazes para o controle da formação de biofilmes (WU et al., 2018b). Nesse contexto, teorias como a termodinâmica, a DLVO e a XDLVO, bem como métodos como o DA e o SEI, são formulados com o objetivo de aprofundar o entendimento das interações entre bactérias e superfícies (HORI; MATSUMOTO, 2010). No entanto, apesar dos avanços promovidos por essas teorias e métodos, ainda persistem lacunas no conhecimento acerca dos fatores que influenciam essas

interações, o que representa um obstáculo significativo para o desenvolvimento de superfícies capazes de inibir, de forma efetiva, a formação de biofilmes (HORI; MATSUMOTO, 2010).

### 2.3.1 Adesão Reversível

Antes da fase reversível, forma-se rapidamente um filme condicionante composto por partículas orgânicas e inorgânicas presentes no meio aquoso, que aderem passivamente à superfície e modificam propriedades como carga, hidrofobicidade e rugosidade, tornando-a mais favorável à colonização bacteriana (SHENG; TING; PEHKONEN, 2007), (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008). À medida que se aproximam da superfície, as bactérias mantêm o movimento browniano, detectam sinais químicos por receptores de membrana e são influenciadas por efeitos hidrodinâmicos (TUSON; WEIBEL, 2013). Estudos indicam que superfícies que não desenvolvem o filme condicionante apresentam menor adesão bacteriana e que cepas com baixa capacidade de adesão, mesmo na presença dessa camada, tendem a ter menor potencial de colonização e patogenicidade, uma vez que a adesão eficaz é essencial para o início da formação de biofilmes em hospedeiros (KATSIKOIANNI; MISSIRLIS, 2004).

Os estágios iniciais da adesão bacteriana são fundamentais para o início da formação de biofilmes (WU et al., 2018b). A adesão começa de forma reversível, ocorrendo rapidamente e sendo mediada por interações hidrodinâmicas, de van der Waals, eletrostáticas e interações ácido-base (TUSON; WEIBEL, 2013). Nessa fase, as bactérias em suspensão se aproximam temporariamente da superfície, impulsionadas por fatores como fluxo de fluido, movimento browniano e gravidade, mesmo não móveis (HORI; MATSUMOTO, 2010), (BERNE et al., 2018) (ver Figura 5).

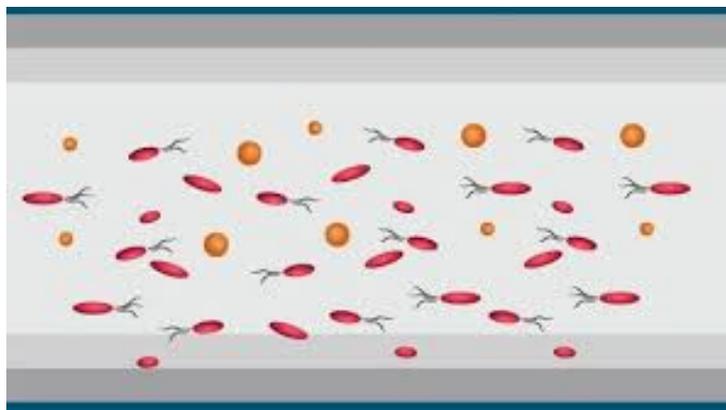


Figura 5 – Bactérias planctônicas em fluido buscando superfície para adesão.

**Fonte:** (ECOLAB, 2025c)

As interações físicas envolvidas na adesão inicial podem ser classificadas como de longo alcance, como as forças de van der Waals e as forças da dupla camada elétrica, que dependem da distância e da energia livre da interação; e de curto alcance, como ligações químicas, interações iônicas, dipolares e hidrofóbicas (ELBOURNE et al., 2019). As forças hidrodinâmicas, resultantes do movimento do fluido ao redor da célula bacteriana, influenciam sua aproximação à superfície e podem facilitar sua remoção por cisalhamento ou pela mobilidade do fluido (MARSHALL; STOUT; MITCHELL, 1971), (TUSON; WEIBEL, 2013). Essas interações, de natureza fraca e transitória, caracterizam a fase de adesão reversível. O contato inicial é fundamental para a transição à fase subsequente da adesão, caracterizada por interações moleculares e celulares mais intensas (KATSIKOIANNI; MISSIRLIS, 2004).

As teorias termodinâmica, DLVO e XDLVO contribuem para a compreensão dos mecanismos que regem a adesão reversível, tratando as células microbianas, especialmente as bactérias, como partículas inertes (TANDOGAN et al., 2017), (HERMANSSON, 1999). Esses modelos analisam as interações físicas e químicas envolvidas na deposição de partículas coloidais não vivas, oferecendo subsídios importantes para entender a fixação inicial de bactérias em superfícies lisas (KATSIKOIANNI; MISSIRLIS, 2004).

### **2.3.2 Adesão Irreversível**

Após a fase reversível, as bactérias deixam de se mover aleatoriamente por movimento browniano, e passam a interagir especificamente com o substrato por meio de suas estruturas de superfície (AN; FRIEDMAN, 2000). Nesse estágio, as forças atrativas superam as repulsivas, caracterizando a adesão irreversível. Em seguida, ocorrem processos de adsorção e fixação que criam condições favoráveis para o desenvolvimento do biofilme (HORI; MATSUMOTO, 2010). As bactérias começam a se multiplicar e a se prender firmemente à superfície, formando ligações seletivas por meio da matriz de EPS (ver Figura 6), marcando o início da consolidação do biofilme (MARSHALL; STOUT; MITCHELL, 1971), (LEMON et al., 2008).

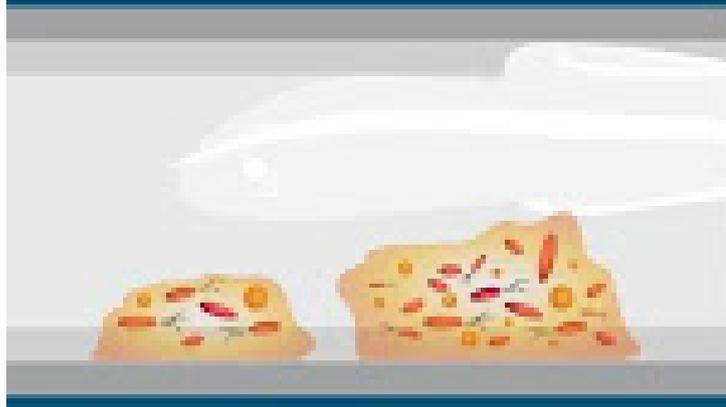


Figura 6 – Bactérias fixas em superfície formando microcolônia e reproduzindo-se.

**Fonte:** (ECOLAB, 2025a)

Apêndices bacterianos como flagelos, fímbrias e pili desempenham um papel essencial na adesão irreversível, auxiliando na superação das forças repulsivas da dupla camada elétrica e promovendo reações químicas, como oxidação e hidratação, que resultam em ligações fortes com a superfície (MERCIER-BONIN et al., 2009), (LOOSDRECHT et al., 1990b), (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008). As adesinas presentes nesses apêndices são fundamentais para a fixação em diferentes tipos de superfícies, tanto inorgânicas quanto biológicas (KATSIKOIANNI; MISIRLIS, 2004). Nessa fase, as bactérias se imobilizam por meio de pontes seletivas formadas por estruturas poliméricas (MARSHALL; STOUT; MITCHELL, 1971), e as interações moleculares tornam-se mais específicas. O estado sésil resultante confere maior resistência às bactérias, favorecendo sua sobrevivência em ambientes adversos (CHENG; FENG; MORARU, 2019).

### 2.3.3 Formação de Biofilmes Bacterianos

A formação de biofilmes bacterianos segue um ciclo dinâmico que se inicia com a adesão das células a uma superfície, passando pelas fases iniciais até atingir a maturação (BOULBENE et al., 2012). Após a adesão irreversível, as bactérias começam a se dividir e formar estruturas em formato de cogumelo, que facilitam o transporte de nutrientes do fluido circundante para o interior da colônia, promovendo sua nutrição. Esse processo de desenvolvimento começa com a multiplicação das células fixadas (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008).

Em condições favoráveis, essa multiplicação leva à formação de microcolônias, que evoluem para estruturas mais complexas, envoltas por uma matriz de EPS (GARRETT; BHAKOO; ZHANG, 2008). Constituída por proteínas, ácido desoxirribonucleico (DNA), polissacarídeos e ácido ribonucleico (RNA) (LEE, 2020), essa matriz fortalece a fixação celular, promove a coesão

entre os microrganismos e contribui para a estabilidade da comunidade ao longo do tempo (ELBOURNE; CRAWFORD; IVANOVA, 2017).

À medida que o biofilme evolui, diferentes níveis de adesão são observados, culminando na produção da matriz extracelular, que garante maior coesão estrutural (GARRETT; BHA-KOO; ZHANG, 2008). A contínua multiplicação celular resulta em uma formação tridimensional robusta, capaz de proteger as bactérias contra variações ambientais, como agentes antimicrobianos e alterações de pH (BOHINC et al., 2014). No estágio final, o biofilme libera células dispersas, que podem colonizar novas superfícies, reiniciando o ciclo (TANDOGAN et al., 2017) (ver Figura 7).

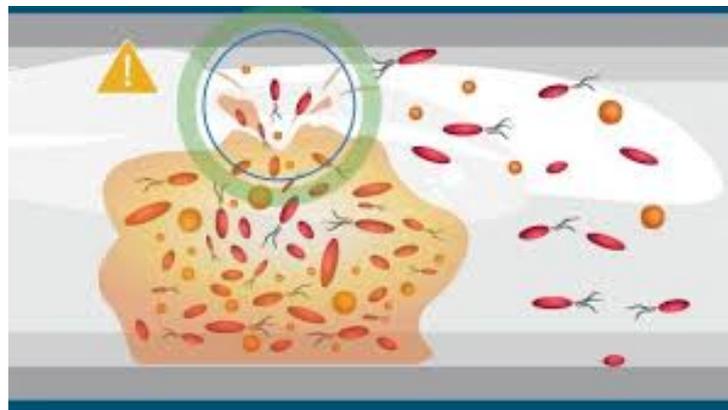


Figura 7 – Organismos dispersam-se do biofilme para formar novas comunidades.

**Fonte:** (ECOLAB, 2025b)

## 2.4 TEORIAS DA ADESÃO BACTERIANA

As forças físico-químicas que influenciam a adesão bacteriana são explicadas principalmente pela teoria termodinâmica e pela teoria DLVO (MERCIER-BONIN et al., 2009), juntamente com a teoria XDLVO, que, além das interações eletrostáticas e de van der Waals, incorpora interações hidrofóbicas/hidrofílicas, abrangendo tanto interações de curto quanto de longo alcance (OSS, 1993). Essas interações ocorrem em um intervalo de aproximadamente 1min durante o processo inicial de adesão bacteriana (ELBOURNE et al., 2019). Embora essas teorias sejam eficazes para calcular a energia de interação entre bactérias e superfícies, sua aplicabilidade é limitada a geometrias específicas, restringindo sua abrangência (BHATTACHARJEE; ELIMELECH, 1997).

Como complemento, o método DA é utilizado para estimar interações entre superfícies curvas, embora também apresente limitações (WU et al., 2018a). Para superar essas restrições, foi introduzido o método SEI, que calcula de forma mais precisa a energia ou a força de

interação por unidade de área entre duas placas planas, permitindo uma avaliação mais realista da adesão bacteriana em superfícies com diferentes formas e texturas (BHATTACHARJEE; ELIMELECH, 1997). No entanto, o SEI também possui suas limitações.

Apesar dessas teorias e modelos avançados, prever completamente o processo de adesão bacteriana continua sendo um desafio. Fatores biológicos, como as propriedades específicas das células bacterianas e as condições ambientais, também desempenham um papel crucial e não podem ser plenamente descritos apenas por modelos físico-químicos (KATSIKOIANNI; MISSIRLIS, 2004).

### 2.4.1 Teoria Termodinâmica

A teoria termodinâmica é amplamente reconhecida como uma das abordagens mais diretas para prever a adesão bacteriana, por se basear na variação da energia livre de Gibbs (PERNI; PREEDY; PROKOPOVICH, 2014). Essa abordagem descreve o processo adesivo como uma tendência natural do sistema em minimizar sua energia livre total, considerando as interações entre as bactérias, a superfície e o meio líquido (PERNI; PREEDY; PROKOPOVICH, 2014). A adesão ocorre quando há uma redução na energia livre do sistema, sendo esse fenômeno diretamente influenciado pelas tensões interfaciais entre os componentes envolvidos (HORI; MATSUMOTO, 2010).

Conforme discutido por Hermansson (1999), a teoria termodinâmica utiliza a equação de Dupré para representar o balanço entre forças atrativas e repulsivas no sistema, relacionando a energia livre de adesão às tensões interfaciais entre os diferentes meios. Essa relação é expressa por:

$$\Delta G^{adh} = \gamma_{BS} - \gamma_{BL} - \gamma_{SL}, \quad (2.1)$$

em que  $\Delta G^{adh}$  representa a energia livre de adesão por unidade de área,  $\gamma_{BS}$  é a energia interfacial entre bactéria e superfície,  $\gamma_{BL}$  refere-se à interação entre bactéria e líquido, e  $\gamma_{SL}$  à interação entre superfície e líquido. A equação considera a formação da nova interface bactéria-superfície, levando em conta a substituição das interfaces preexistentes com o meio líquido (HORI; MATSUMOTO, 2010).

A adesão bacteriana tende a ocorrer espontaneamente quando a variação da energia livre de adesão,  $\Delta G^{adh}$ , é negativa (HERMANSSON, 1999), o que indica uma transição para um estado

energeticamente mais estável. Em contraste, valores positivos de  $\Delta G^{\text{adh}}$  indicam que a adesão é termodinamicamente desfavorável, e o sistema tende a permanecer separado (KATSIKOIANNI; MISSIRLIS, 2004).

A condição de adesão pode ser expressa, segundo Perti, Preedy e Prokopovich (2014), pela seguinte inequação:

$$\gamma_{BS} < \gamma_{BL} + \gamma_{SL}. \quad (2.2)$$

Para ilustrar esse comportamento, a Figura 8 apresenta a variação da energia livre de adesão em função de  $\gamma_{BS}$ , considerando  $\gamma_{BL}$  e  $\gamma_{SL}$  fixos em 30 e 40  $\text{mJ}/\text{m}^2$ , respectivamente. Essa visualização permite identificar os valores críticos de  $\gamma_{BS}$  que tornam a adesão energeticamente favorável (região onde  $\Delta G^{\text{adh}} < 0$ ).

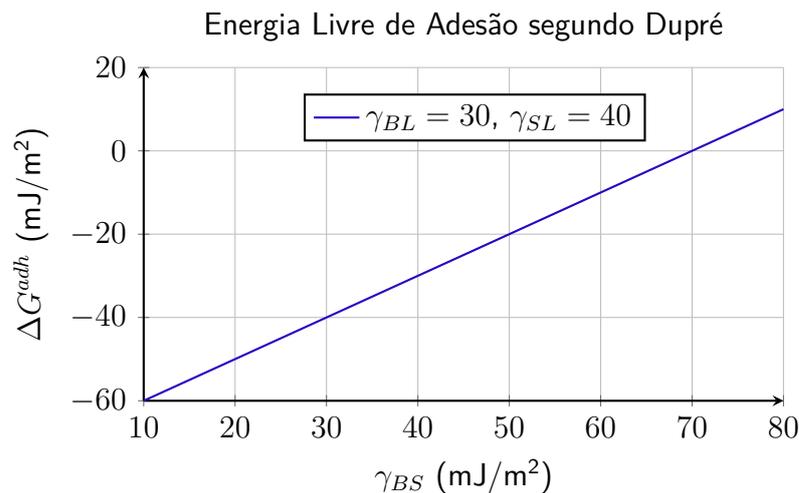


Figura 8 – Variação de  $\Delta G^{\text{adh}}$  em função de  $\gamma_{BS}$  com  $\gamma_{BL} = 30$  e  $\gamma_{SL} = 40$ .

Fonte: Da autora

#### 2.4.2 Teoria DLVO

A teoria DLVO, desenvolvida por Derjaguin e Landau (DERJAGUIN, 1941) e, independentemente, por Verwey e Overbeek (VERWEY; OVERBEEK, 1955), foi formulada para descrever as interações entre partículas coloidais em suspensão. Desde então, consolidou-se como um dos fundamentos da ciência de coloides e superfícies, sendo amplamente empregada na previsão da estabilidade de dispersões coloidais (PERNI; PREEDY; PROKOPOVICH, 2014), (HORI; MATSUMOTO, 2010). Dada a semelhança de escala entre partículas coloidais e bactérias — com

diâmetro típico entre 0,5 e  $2\mu m$  — a teoria DLVO passou a ser utilizada também na descrição da adesão bacteriana a superfícies (HERMANSSON, 1999).

A primeira aplicação da teoria DLVO ao estudo da adesão bacteriana foi realizada por Marshall, Stout e Mitchell (1971), com o intuito de prever a formação de biofilmes em diferentes superfícies (PERNI; PREEDY; PROKOPOVICH, 2014). Desde então, essa abordagem tem sido amplamente empregada na modelagem da adesão bacteriana, considerando que as interações entre as células e superfícies planas podem ser descritas como a soma de duas forças principais: as forças atrativas de van der Waals e as forças repulsivas decorrentes da sobreposição das duplas camadas elétricas (HERMANSSON, 1999).

A interação entre superfícies é fortemente influenciada pelas forças de van der Waals, que atuam em distâncias muito curtas e promovem a atração entre as superfícies. Quando essas superfícies estão imersas em um meio líquido, uma força adicional de caráter repulsivo emerge: a repulsão da dupla camada elétrica. Essa repulsão decorre da interação eletrostática de Coulomb entre superfícies carregadas, aliada a efeitos entrópicos associados à redistribuição dos íons presentes no meio (HERNÁNDEZ, 2023).

Tais interações são caracterizadas pelo potencial zeta, que expressa a magnitude da carga elétrica na interface entre uma partícula suspensa — como uma célula bacteriana ou uma superfície — e o fluido que a envolve (PERNI; PREEDY; PROKOPOVICH, 2014), (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 1996). Esse potencial representa uma medida físico-química importante para a compreensão das interações eletrostáticas em meio líquido. De modo geral, em maiores distâncias entre as superfícies, predominam as forças repulsivas da dupla camada elétrica, enquanto em distâncias menores as forças atrativas de van der Waals tornam-se mais significativas (HORI; MATSUMOTO, 2010).

A teoria DLVO fundamenta-se na minimização de potenciais termodinâmicos, como a energia livre de Gibbs, para descrever as interações entre bactérias e superfícies em função da distância entre elas (SPENGLER et al., 2021). Nesse contexto, a energia livre total de adesão bacteriana, representada por  $\Delta G^{adh}$ , é decomposta em dois principais componentes:  $\Delta G^{vdW}$ , que corresponde às interações atrativas de van der Waals, e  $\Delta G^{dl}$ , relacionado às forças repulsivas decorrentes da sobreposição das duplas camadas elétricas. O equilíbrio entre essas forças determina a estabilidade da interação, influenciando se as células bacterianas tenderão à aproximação e adesão à superfície, ou à repulsão (SPENGLER et al., 2021). A equação que expressa essa interação é dada por (HERMANSSON, 1999):

$$\Delta G^{adh} = \Delta G^{vdW} + \Delta G^{dl}. \quad (2.3)$$

Nesse contexto, a equação 2.3 pode ser representada graficamente para ilustrar como o equilíbrio entre as forças atrativas de van der Waals e as forças repulsivas da dupla camada elétrica resulta na energia livre total de adesão bacteriana ( $\Delta G^{adh}$ ) em função da distância  $r$  entre a bactéria e a superfície.

A Figura 9 apresenta a curva do potencial DLVO, evidenciando os perfis de energia associados a cada interação e o ponto de equilíbrio no qual a energia livre total atinge um mínimo local.

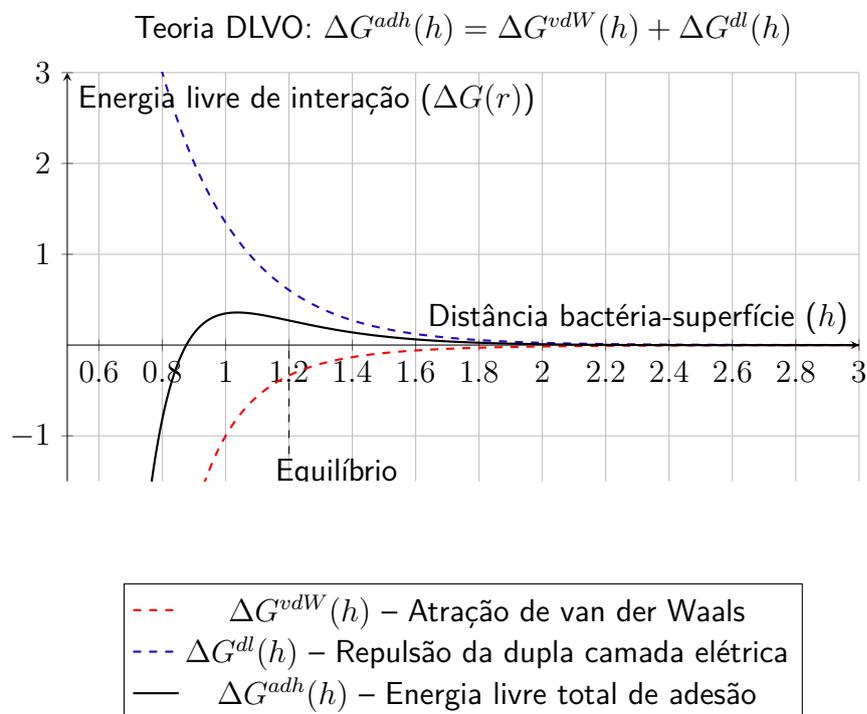


Figura 9 – Curva do potencial DLVO  $\Delta G^{adh}(h)$  em função da distância  $h$ .

Fonte: Da autora

Observa-se que, em maiores distâncias, a repulsão eletrostática predomina, dificultando a aproximação da bactéria à superfície. Por outro lado, em menores distâncias, a atração de van der Waals se sobressai, favorecendo a adesão bacteriana. O ponto mínimo na curva da energia livre total corresponde a uma posição de equilíbrio metaestável, na qual a bactéria pode permanecer aderida sem a necessidade de forças externas adicionais. Esse equilíbrio pode ser superado por interações adicionais, como pontes de hidrogênio, interações hidrofóbicas ou presença de polímeros extracelulares, não contempladas na teoria DLVO (HERMANSSON, 1999).

### 2.4.3 Teoria XDLVO

A teoria XDLVO, proposta por Oss (1993), estende a teoria DLVO ao incorporar as interações ácido-base de Lewis dependentes da distância, que refletem a natureza hidrofílica ou hidrofóbica das superfícies. Essas interações, baseadas na troca de elétrons, são fundamentais para descrever a adesão de partículas a superfícies, especialmente em sistemas biológicos. O modelo XDLVO oferece uma visão mais completa da adesão em sistemas complexos, como biofilmes e materiais poliméricos, sendo particularmente eficaz para explicar fenômenos que não podem ser interpretados apenas pela teoria DLVO ou por abordagens termodinâmicas (HERMANSSON, 1999).

A energia livre de interação por unidade de área segundo a teoria XDLVO é expressa por:

$$\Delta G^{adh}(h) = \Delta G^{vdW}(h) + \Delta G^{dl}(h) + \Delta G^{AB}(h), \quad (2.4)$$

onde  $\Delta G^{vdW}(h)$  representa a energia de van der Waals,  $\Delta G^{dl}(h)$  corresponde à energia de interação da dupla camada elétrica e  $\Delta G^{AB}(h)$  refere-se à energia ácido-base de Lewis.

As expressões matemáticas dessas contribuições, para superfícies planas infinitas separadas por uma distância  $h$ , são (BAYOUDH et al., 2009):

$$\Delta G^{vdW}(h) = -\frac{A_H}{12\pi h^2}, \quad (2.5)$$

$$\Delta G^{AB}(h) = \Delta G_{h_0}^{AB} \exp\left(\frac{h_0 - h}{\lambda}\right), \quad (2.6)$$

$$\Delta G^{dl}(h) = \epsilon \epsilon_0 \kappa \psi_b \psi_s \left[ \frac{\psi_b^2 + \psi_s^2}{2\psi_b \psi_s} (1 - \coth \kappa h) + \frac{1}{\sinh \kappa h} \right]. \quad (2.7)$$

Nessas equações,  $A_H$  é a constante de Hamaker,  $\Delta G_{h_0}^{AB}$  é a energia ácido-base no contato (em  $h_0$ ),  $\lambda$  é o comprimento de decaimento das interações ácido-base na água,  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica do vácuo,  $\epsilon$  é a constante dielétrica da água,  $\kappa$  é o inverso do comprimento de Debye,  $\psi_b$  e  $\psi_s$  são os potenciais das superfícies bacteriana e do substrato,  $h_0$  é a separação mínima, associada à repulsão de Born.

A constante de Hamaker pode ser calculada conforme apresentado por (HOEK; AGARWAL, 2006):

$$A_H = -12\pi h_0^2 \Delta G_{h_0}^{vdW}, \quad (2.8)$$

onde  $\Delta G_{h_0}^{vdW}$  representa a variação da energia livre de interação de van der Waals por unidade de área no contato e pode ser obtida por:

$$\Delta G_{h_0}^{vdW} = 2(\sqrt{\gamma_w^{vdw}} - \sqrt{\gamma_s^{vdw}})(\sqrt{\gamma_b^{vdw}} - \sqrt{\gamma_w^{vdw}}). \quad (2.9)$$

A contribuição da interação ácido-base para a energia livre no contato é dada por:

$$\Delta G_{h_0}^{AB} = 2\sqrt{\gamma_w^+}(\sqrt{\gamma_s^-} + \sqrt{\gamma_b^-} - \sqrt{\gamma_w^-}) + 2\sqrt{\gamma_w^-}(\sqrt{\gamma_s^+} + \sqrt{\gamma_b^+} - \sqrt{\gamma_w^+}) - 2(\sqrt{\gamma_s^+ \gamma_b^-} - \sqrt{\gamma_s^- \gamma_b^+}), \quad (2.10)$$

em que  $\gamma^+$ ,  $\gamma^-$  e  $\gamma^{vdw}$  correspondem respectivamente, às componentes ácido, base e de van der Waals das tensões superficiais.

A partir dessas equações, foram obtidas as curvas teóricas das contribuições individuais -  $\Delta G^{vdW}(h)$ ,  $\Delta G^{dl}(h)$ ,  $\Delta G^{AB}(h)$  - e da energia livre total  $\Delta G^{adh}(h)$ , calculadas com parâmetros típicos da literatura.

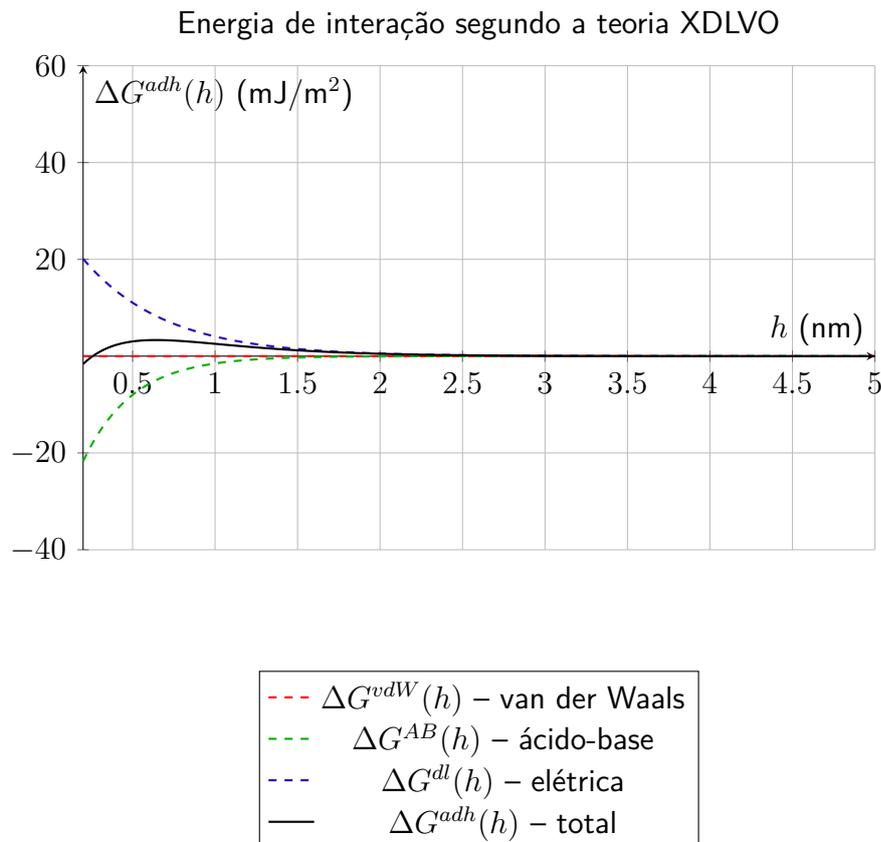


Figura 10 – Curvas teóricas das energias de interação segundo a teoria XDLVO, com parâmetros ajustados.

Fonte: Da autora.

A Figura 10 mostra que a energia livre total  $\Delta G^{adh}(h)$  resulta da soma das interações atrativas e repulsivas. Observa-se a presença de uma barreira de energia, que pode explicar a

dificuldade de adesão bacteriana sob determinadas condições ambientais. Essa barreira ocorre a uma distância  $h$  característica, cujo valor depende dos parâmetros do sistema. Isso evidencia que a adesão bacteriana pode ser favorecida ou dificultada por mudanças no potencial de superfície, no pH ou na força iônica do meio.

#### 2.4.4 Método da Aproximação de Derjaguin (DA)

Como descrito por Israelachvili (2011), o método DA simplifica o cálculo das forças entre superfícies curvas, tratando a interação como se ocorresse entre superfícies planas, desde que a distância entre elas seja muito menor do que o raio de curvatura dessas superfícies.

Hoek e Agarwal (2006) explicaram que Derjaguin propôs uma solução analítica aproximada para calcular a energia de interação total entre duas esferas ou entre uma esfera e uma superfície plana. Essa solução trata a separação interfacial variável como uma série de anéis concêntricos, que podem ser modelados como placas planas de espessura infinitesimal. A energia total de interação é obtida integrando as energias de interação dessas “placas” ao longo da área das superfícies curvas próximas ao ponto de contato mais próximo. A Figura 11 ilustra esquematicamente essa aproximação proposta no método DA.

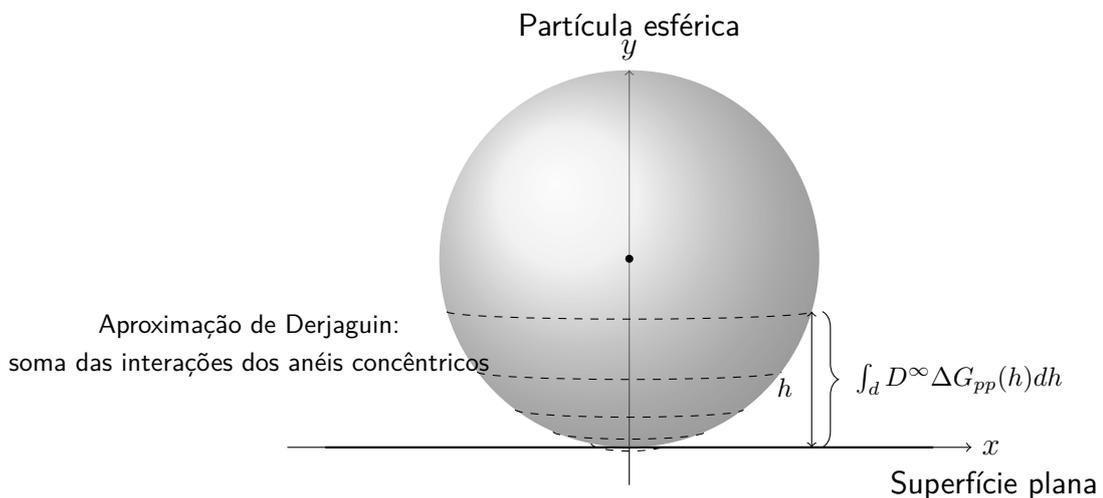


Figura 11 – Energia de interação esfera-plano (representação esquemática).

Fonte: Da autora

A expressão geral para o DA, conforme apresentado por Hoek e Agarwal (2006), baseia-se na integração das energias de interação ao longo da área superficial curva. A equação que a descreve é dada por:

$$U_{DA}(dD) = f(a) \int_d^\infty D^\infty \Delta G_{pp}(h) dh, \quad (2.11)$$

onde  $dD$  representa a separação mínima entre as superfícies,  $a$  é o raio esférico da partícula, e  $f(a)$  é uma função que varia de acordo com a configuração geométrica. Para duas esferas, temos  $f(a) = \frac{2\pi a_1 a_2}{a_1 + a_2}$ , enquanto, no caso de uma esfera e uma placa plana,  $f(a) = 2\pi a$ . Além disso,  $h$  denota a distância de separação local entre os anéis paralelos, e a integral considera a energia livre de interação  $\Delta G_{pp}(h)$  ao longo da distância  $h$ .

Conforme descrito por Hoek e Agarwal (2006), ao substituir as expressões das energias de interação das equações 2.5, 2.6 e 2.7 na equação 2.11, e realizar a integração para o caso de interação entre uma esfera ( $S$ ) e uma placa plana ( $P$ ), obtêm-se as seguintes expressões:

$$\Delta G_{SP}^{vdW}(dD) = -\frac{A_H a}{6dD}, \quad (2.12)$$

$$\Delta G_{SP}^{AB}(dD) = 2\pi a \lambda \Delta G h_0^{AB} \exp\left(\frac{dh_0 - dD}{\lambda}\right), \quad (2.13)$$

$$\Delta G_{SP}^{dl}(dD) = \pi \epsilon \epsilon_0 a \left[ 2\psi_p \psi_m \ln\left(\frac{1 + \exp(-\kappa dD)}{1 - \exp(-\kappa dD)}\right) + (\psi_p^2 + \psi_m^2) \ln(1 - \exp(-2\kappa dD)) \right]. \quad (2.14)$$

A validade do método DA, conforme discutido por White (1983), baseia-se na suposição de que a energia de interação é predominantemente determinada por uma pequena região próxima ao ponto de maior aproximação entre as superfícies. Para que essa suposição seja válida, é necessário que a energia decaia rapidamente à medida que a distância  $h$  aumenta, de modo que as contribuições provenientes de regiões mais distantes possam ser desconsideradas, mesmo quando os efeitos de curvatura se tornam mais pronunciados.

Ainda segundo White (1983), o método DA é aplicável a diferentes tipos de interações, incluindo, mas não se limitando às forças de van der Waals e às forças de dupla camada elétrica. No entanto, para que o DA seja considerado confiável, a escala de comprimento associada ao decaimento da energia de interação deve ser significativamente menor do que o menor raio de curvatura das superfícies envolvidas. Essa condição é frequentemente satisfeita em sistemas que envolvem interações eletrostáticas.

A Figura 12 apresenta uma representação esquemática das energias em função da distância entre a partícula e a superfície, conforme o método DA.

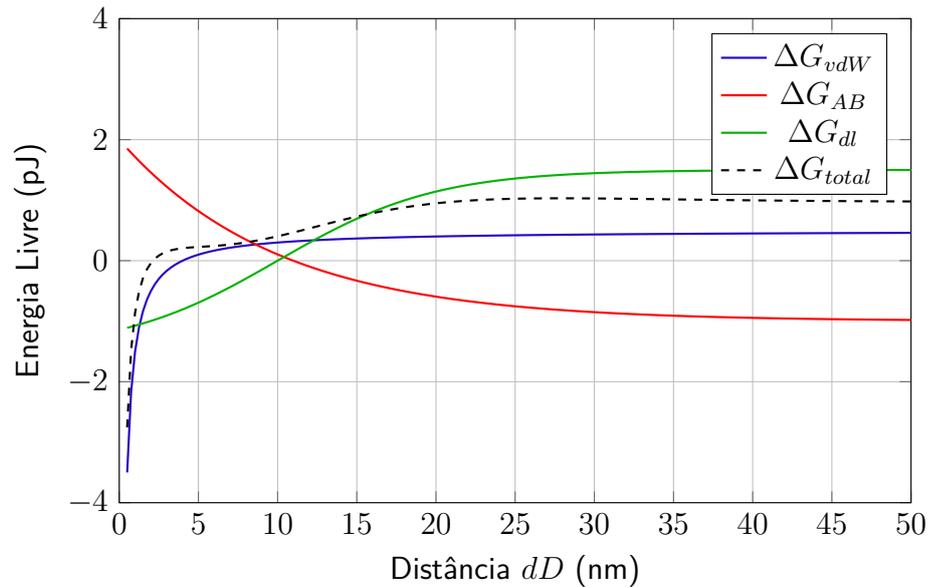


Figura 12 – Energia de interação esfera-plano (representação esquemática).

Fonte: Da autora

Observa-se que a energia de van der Waals ( $\Delta G_{vdW}$ ) tende a valores atrativos à medida que a distância diminui, enquanto a interação da dupla camada elétrica ( $\Delta G_{dl}$ ) apresenta um caráter predominantemente repulsivo em pequenas distâncias. A interação ácido-base ( $\Delta G_{AB}$ ) contribui com um efeito adicional de curto alcance, que pode ser atrativo ou repulsivo dependendo da natureza das superfícies. A energia total ( $\Delta G_{total}$ ), obtida pela aplicação do método DA e representada pela energia potencial ( $U_{DA}(dD)$ ), resulta da soma dessas contribuições, podendo exibir um mínimo energético que favorece a adesão da partícula à superfície.

Este comportamento qualitativo, mostrado na Figura 12, é fundamental para compreender os processos de adesão bacteriana, uma vez que ( $U_{DA}(dD)$ ) descreve o perfil energético da interação em função da distância.

#### 2.4.5 Método Integração de Elementos de Superfície (SEI)

Segundo Bhattacharjee e Elimelech (1997), o método SEI permite calcular as interações de van der Waals e de dupla camada elétrica entre uma partícula esférica e uma superfície plana infinita. Essa abordagem baseia-se nas interações por unidade de área entre duas superfícies planas, proporcionando resultados mais precisos para a energia de interação em comparação com a fórmula clássica de Hamaker, apresentada na equação 2.8. O SEI utiliza expressões analíticas derivadas da equação de Poisson-Boltzmann linearizada para determinar a energia

eletrostática associada à interação.

Ainda segundo Bhattacharjee e Elimelech (1997), o SEI realiza uma avaliação rigorosa das interações, em contraste com a aproximação de Derjaguin, que tende a superestimar a energia de interação, especialmente em sistemas com partículas de pequeno porte e em soluções com baixa concentração de eletrólitos. Essa limitação ocorre porque o DA não leva em consideração, de forma precisa, os efeitos das distâncias variáveis e das geometrias curvas, o que restringe sua aplicabilidade em cenários mais complexos.

A abordagem central do SEI, conforme descrito por Bhattacharjee e Elimelech (1997), consiste na divisão da superfície da partícula esférica em pequenos elementos de área  $dA$ . Para cada elemento, calcula-se a interação com a superfície plana, levando em conta a distância local  $h$ , que varia ao longo da curvatura da esfera. As contribuições individuais das interações de van der Waals e de dupla camada elétrica são determinadas separadamente para cada um desses elementos.

Para o cálculo da interação de van der Waals por unidade de área entre superfícies planas, utiliza-se a fórmula clássica de Hamaker. No contexto esférico, a energia associada a cada elemento da superfície é obtida por meio da integração da versão modificada dessa fórmula, que leva em consideração a distância variável entre a esfera e a superfície plana. Essa versão adaptada da expressão clássica incorpora os efeitos geométricos da partícula esférica, incluindo explicitamente o raio da partícula e a distância de separação em cada ponto (BHATTACHARJEE; ELIMELECH, 1997).

Em relação à interação eletrostática, a equação de Poisson-Boltzmann linearizada é utilizada para calcular a energia da dupla camada elétrica, levando em consideração a distribuição do potencial eletrostático ao redor da partícula e da superfície. Esse modelo permite uma caracterização mais precisa das interações em sistemas onde a geometria e a variação espacial das forças desempenham papéis significativos, como no caso de superfícies rugosas ou partículas de pequenas dimensões (BHATTACHARJEE; ELIMELECH, 1997).

A interação total entre a partícula esférica e a superfície plana é obtida por meio da integração das contribuições de todos os elementos  $dA$  ao longo da superfície esférica. Essa integração considera as variações na distância entre os pontos da esfera e a superfície plana, proporcionando uma descrição detalhada e precisa da interação. A energia total de interação é expressa pela seguinte equação (BHATTACHARJEE; ELIMELECH, 1997):

$$E_{total} = \int_S (E_{vdW}(h) + E_{el}(h)) dA, \quad (2.15)$$

onde  $S$  denota a superfície da partícula esférica,  $E_{vdW}(h)$  representa a energia de van der Waals e  $E_{el}(h)$  a energia eletrostática, ambas avaliadas em função da distância local  $h$  entre cada ponto da superfície esférica e a superfície plana. As energias são calculadas individualmente para cada elemento infinitesimal da superfície da partícula, considerando-se a variação espacial dessa distância. A integral sobre a superfície  $S$  soma todas as contribuições locais, resultando na energia total de interação. Essa formulação oferece uma estimativa mais precisa das forças atuantes, especialmente em sistemas onde a geometria das superfícies não é uniforme e a distância entre os corpos varia significativamente ao longo da interface de interação.

A Figura 13 ilustra o princípio do método SEI, destacando a decomposição da superfície esférica em elementos  $dA$  e as respectivas distâncias locais  $h$  utilizadas no cálculo das energias de interação.

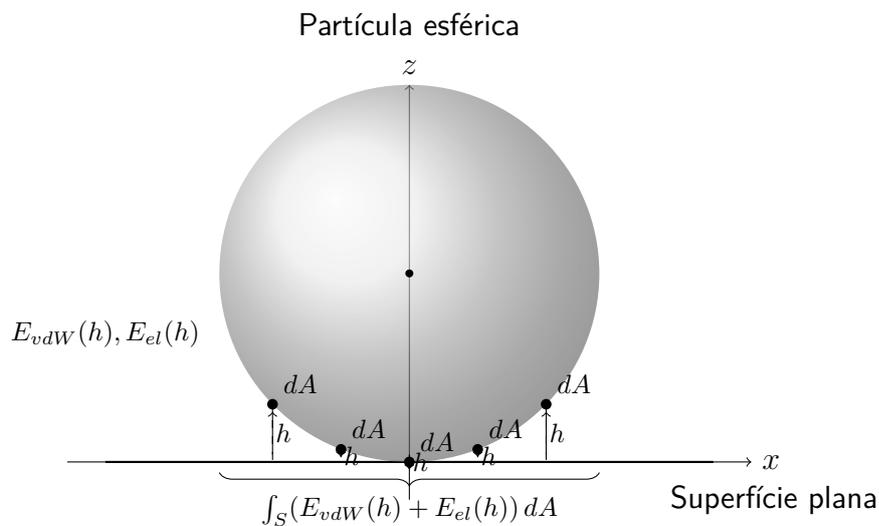


Figura 13 – Energia de interação esfera-plano por SEI.

**Fonte:** Da autora

A Figura 14 apresenta o perfil de energia livre de interação em função da distância mínima entre as superfícies, destacando separadamente as contribuições das interações de van der Waals, da interação eletrostática, bem como a energia total resultante da soma dessas forças.

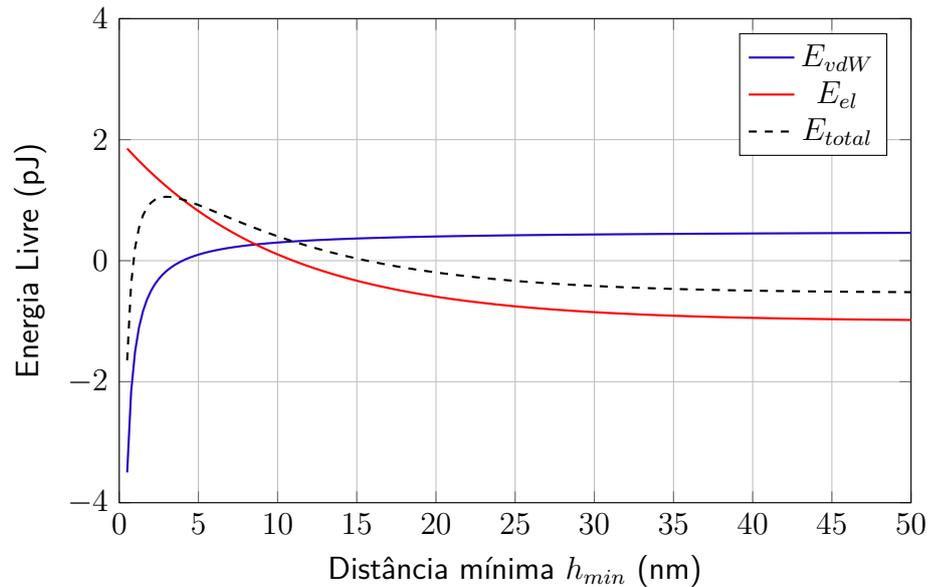


Figura 14 – Energia de interação esfera-plano calculada por SEI.

Fonte: Da autora

#### 2.4.5.1 Algumas Limitações das Teorias da Adesão Bacteriana

As teorias termodinâmica, DLVO e XDLVO fornecem uma base importante para o estudo da adesão bacteriana, mas se mostram insuficientes para descrever com precisão a adesão de bactérias reais e fenômenos complexos, como a formação de biofilmes (HORI; MATSUMOTO, 2010), (CRAWFORD et al., 2012).

Essas teorias tratam as células bacterianas como partículas coloidais inertes, desconsiderando suas características biológicas e morfológicas (HERMANSSON, 1999), (HORI; MATSUMOTO, 2010), além de assumirem superfícies ideais, lisas e com propriedades químicas uniformes, limitando-se a considerar apenas a distância mínima entre a bactéria e a superfície (BHATTACHARJEE; SHARMA; BHATTACHARYA, 1996). No entanto, a presença de apêndices celulares, como pili e flagelos, influencia as interações de adesão, desviando-se das previsões desses modelos (HORI; MATSUMOTO, 2010).

Métodos como o DA e o SEI foram propostos para superar algumas dessas limitações, ao simplificarem a modelagem das interações e considerarem variações locais de topografia nas superfícies, proporcionando uma aproximação mais realista dos efeitos da adesão (CRAWFORD et al., 2012). No entanto, o DA apresenta restrições significativas, como sua aplicação limitada a partículas grandes e interações de curta distância, além de desconsiderar os efeitos de curvatura e interações de longo alcance (RUSSEL et al., 1991), (ISRAELACHVILI, 2011). Esse

método também negligencia a rugosidade das superfícies e assume interações aditivas, o que compromete sua precisão em superfícies não lisas (WHITE, 1983), (SIEGISMUND et al., 2014). O SEI, embora eficaz em sistemas simples, apresenta limitações como elevado custo computacional (BHATTACHARJEE; ELIMELECH, 1997), baixa acurácia das aproximações eletrostáticas em altas concentrações de eletrólitos (CAI et al., 2011) e dificuldades no tratamento de geometrias complexas ou superfícies finitas (RUSSEL et al., 1991).

Uma limitação crítica comum a essas abordagens é a ausência do efeito do fluxo de fluido, um fator essencial nas interações bacterianas (PERNI; PREEDY; PROKOPOVICH, 2014). As interações em meio fluido envolvem múltiplos corpos e efeitos dinâmicos, que não são contemplados por teorias que assumem interações no vácuo (ISRAELACHVILI, 2010).

Apesar dos avanços proporcionados por essas metodologias, elas ainda enfrentam dificuldades na modelagem de superfícies complexas, o que evidencia a necessidade de abordagens mais dinâmicas e detalhadas.

## 2.5 FATORES QUE INFLUENCIAM A ADESÃO BACTERIANA EM MEIOS AQUOSOS

A adesão bacteriana constitui um processo natural que ocorre em ambientes aquosos e é influenciada por diversos fatores, como as propriedades do ambiente, das superfícies e das células bacterianas envolvidas (KATSIKOIANNI; MISSIRLIS, 2004), (MERCIER-BONIN et al., 2009). Quando se considera a adesão unicelular, por exemplo, a disponibilidade de nutrientes no meio pode tanto favorecer quanto dificultar o processo, afetando diretamente a capacidade de fixação das bactérias (BERNE et al., 2018). Trata-se, portanto, de um fenômeno multifatorial, no qual as propriedades físico-químicas das superfícies e as características intrínsecas das células interagem de forma complexa, determinando não apenas a eficácia, mas também a reversibilidade da adesão.

Nesse cenário multifatorial, tanto as características das superfícies quanto as das células bacterianas exercem influência decisiva sobre o processo de adesão. Elbourne et al. (2019) identificaram diversas propriedades físico-químicas das superfícies que afetam essa interação, como a química nativa, a carga elétrica, a rigidez do substrato, o grau de hidrofobicidade, a rugosidade intrínseca, a geometria em diferentes escalas (macro, micro e nano) e a energia livre superficial. Esses fatores interferem não apenas na atração inicial entre a célula e o substrato, mas também nas forças intermoleculares responsáveis pela fixação.

Além disso, as propriedades das próprias células bacterianas desempenham um papel igual-

mente relevante. De acordo com Hori e Matsumoto (2010), atributos como carga superficial, hidrofobicidade, produção de EPS e a presença de apêndices (como pili, fímbrias, flagelos e adesinas) influenciam diretamente a adesão. Essas interações, por sua vez, são moduladas por condições ambientais, incluindo a disponibilidade de nutrientes, o pH, a temperatura e a presença de agentes antimicrobianos, os quais impactam não só a adesão inicial, mas também a formação subsequente de biofilmes.

### 2.5.1 Impacto da Rugosidade Superficial na Adesão Bacteriana

A rugosidade superficial influencia de forma significativa a adesão bacteriana, podendo tanto favorecer quanto dificultar essa interação, dependendo da escala, da morfologia da superfície e das condições do ambiente. Essa compreensão é crucial para o desenvolvimento de superfícies funcionais, especialmente em aplicações biomédicas e industriais. Apesar dos avanços, ainda há controvérsias sobre a intensidade e a direção desse efeito, o que exige uma análise cuidadosa de fatores como o tipo de bactéria, a topografia da superfície e o meio em que ocorre a interação.



Figura 15 – Bactéria aderida a superfície lisa e nanoestruturada (dados reais de AFM).

**Fonte:** (Royal Society of Chemistry, 2019)

Em especial, estruturas na escala nanométrica têm se mostrado determinantes nesse processo (SPENGLER et al., 2019). No entanto, os estudos sobre o impacto da rugosidade em

nanoescala apresentam resultados divergentes: algumas pesquisas indicam menor adesão em superfícies mais rugosas, enquanto outras apontam maior fixação bacteriana em superfícies lisas (CRAWFORD et al., 2012). Essas discrepâncias podem estar relacionadas às variações na nanoestrutura das superfícies, que influenciam diretamente as forças de interação entre célula e superfície. A Figura 15 ilustra esse fenômeno, destacando a importância da análise em escala nanométrica para o desenvolvimento de materiais que inibem a contaminação microbiana e a formação de biofilmes (SPENGLER et al., 2019).

Nesse contexto, Lazzini et al. (2021) destacam o crescente interesse por superfícies micro e nanoestruturadas como estratégia para inibir a formação de biofilmes. O efeito antibacteriano dessas superfícies está diretamente relacionado ao tamanho das saliências presentes: enquanto estruturas menores que as células bacterianas tendem a limitar a adesão ao reduzir a área de contato, saliências maiores podem favorecer a fixação por fornecerem mais pontos de ancoragem e proteção contra forças de cisalhamento do fluido.

Além do tamanho das saliências, outros fatores físicos e químicos relacionados à superfície interferem na adesão bacteriana. Segundo Mu et al. (2023b), a rugosidade pode reduzir a energia de ativação necessária para a fixação celular ao aumentar a área de contato. Essa característica, por sua vez, afeta diretamente a interação entre as bactérias e a superfície. Al-Amshawee et al. (2021) observaram que superfícies rugosas também modificam a molhabilidade, o que impacta a formação de biofilmes. Superfícies super-hidrofóbicas, por exemplo, podem inibir a adesão, embora a resposta bacteriana varie conforme suas estruturas, como fímbrias e flagelos (YANG et al., 2022).

A rugosidade também influencia a mobilidade das bactérias após a adesão. Conforme relatado por Al-Amshawee et al. (2021), superfícies irregulares podem restringir esse movimento, favorecendo a formação de biofilmes mais estáveis. Em contrapartida, quando as irregularidades são excessivas, podem dificultar a ancoragem celular e reduzir a força de adesão (YANG et al., 2022). Fatores adicionais, como a presença de revestimentos orgânicos — por exemplo, saliva —, podem ainda modificar essa dinâmica, revertendo padrões previamente observados.

Do ponto de vista molecular, a adesão é mediada por forças físicas e químicas, como interações de van der Waals, eletrostáticas e ligações específicas com proteínas de adesão. A rugosidade altera essas forças ao modificar a geometria da interface e a distribuição das áreas de contato, o que pode tanto facilitar quanto dificultar a fixação inicial. Embora superfícies rugosas aumentem a aderência ao expandir a área de contato, as variações topográficas introduzem complexidade ao processo, afetando a estabilidade e o desenvolvimento dos biofilmes

(LAZZINI et al., 2021).

Por fim, Lazzini et al. (2021) ressaltam que superfícies rugosas, quando compatíveis com as dimensões e propriedades das bactérias, favorecem a formação de biofilmes mais densos e resistentes, ao passo que superfícies lisas tendem a dificultar o agrupamento e promover o desprendimento celular. No entanto, a desproporção entre a rugosidade e as características da célula pode comprometer a adesão e, conseqüentemente, a colonização da superfície.

Essas evidências reforçam a importância do controle da rugosidade superficial no desenvolvimento de materiais antimicrobianos. Estratégias que buscam manipular a nano e microestrutura das superfícies têm se mostrado promissoras para reduzir a contaminação bacteriana, especialmente em dispositivos médicos e superfícies de processamento de alimentos, onde a prevenção da formação de biofilmes é essencial (DUN et al., 2023).

## 3 FLUIDOS

### 3.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta os conceitos fundamentais sobre fluidos, iniciando com a definição de tensão de cisalhamento e a hipótese do contínuo, seguidas pela descrição das propriedades essenciais ao desenvolvimento desta tese. Em seguida, é feita a classificação dos fluidos mais relevantes para o contexto estudado. Os principais conceitos da Mecânica dos Fluidos são explorados, com ênfase nos tipos de escoamento e nas condições de contorno, fundamentais para a compreensão do comportamento dos fluidos nas fronteiras do domínio. Também são discutidas as leis básicas que regem o movimento dos fluidos. O capítulo é concluído com a diferenciação entre sistema e volume de controle, indispensáveis para a análise do escoamento, e com a introdução das abordagens euleriana e lagrangiana, adotadas conforme a natureza do problema e as características do escoamento considerado.

### 3.2 FLUIDOS

Segundo Cengel e Cimbala (2015), substâncias no estado líquido ou gasoso são denominadas fluidos. Diferentemente dos sólidos, que resistem à deformação mantendo uma forma fixa, os fluidos não possuem forma definida e se caracterizam pela capacidade de se deformar continuamente quando submetidos a uma tensão de cisalhamento (ou tensão tangencial), mesmo que essa tensão seja pequena.

#### 3.2.1 Tensão de Cisalhamento

De acordo com Fox e McDonald (1998), a tensão de cisalhamento é a força por unidade de área que atua paralelamente a uma superfície, provocando sua deformação. Essa relação é expressa pela equação:

$$\tau = \frac{F}{A}, \quad (3.1)$$

em que  $\tau$  representa a tensão de cisalhamento,  $F$  é a força tangencial aplicada e  $A$  é a área de aplicação, descrevendo a relação entre a força tangencial e a área de contato. Tal conceito

é fundamental para a compreensão do comportamento dos fluidos sob a ação de tensões.

Segundo Cengel e Cimbala (2015), fluidos se deformam continuamente sob qualquer tensão de cisalhamento, por menor que seja, e não a sustentam em repouso. Nessa condição, a tensão é proporcional à taxa de deformação. Em contraste, sólidos resistem à tensão de cisalhamento, deformando-se até um ponto em que a tensão se torna proporcional à deformação, mantendo-se estáticos após a aplicação da força.

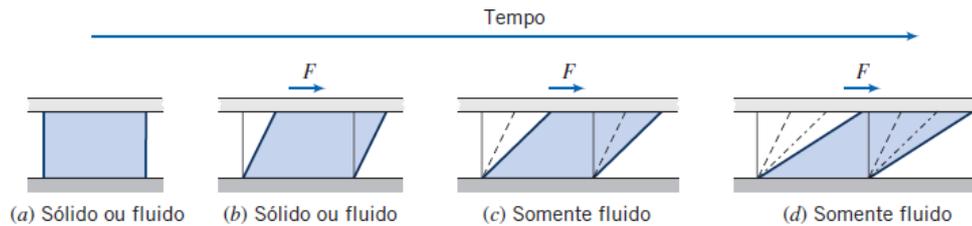


Figura 16 – Diferença de comportamento entre sólido e fluido sob a influência da força de cisalhamento  $F$ .

**Fonte:** (FOX; MCDONALD, 1998)

A Figura 16, conforme apresentado por Fox e McDonald (1998), mostra duas placas paralelas separadas por um objeto retangular, que pode representar um sólido ou um fluido (Figura 16(a)). Quando uma força de cisalhamento  $F$  é aplicada horizontalmente à placa superior, mantendo-se a inferior fixa, ocorre uma deformação do objeto (Figura 16(b)). Considerando que não há deslizamento entre o objeto e as placas, o comportamento observado depende da natureza do material. No caso de um sólido, após a deformação inicial, atinge-se uma configuração de equilíbrio estático, na qual o material permanece em repouso. Já no caso de um fluido, a deformação prossegue continuamente enquanto a força for mantida (Figuras 16(c) e 16(d)), caracterizando uma das principais distinções entre sólidos e fluidos.

A força de atrito que se opõe ao movimento, de mesma intensidade que a força de cisalhamento  $F$ , é gerada na interface entre a placa superior e o objeto, e pode ser expressa por:

$$F = \tau A, \quad (3.2)$$

em que  $F$  é a força tangencial aplicada,  $\tau$  a tensão de cisalhamento e  $A$  a área de contato. Essa equação representa o equilíbrio de forças no sistema e constitui um conceito fundamental para diferenciar o comportamento de sólidos e fluidos quando submetidos a tensões de cisalhamento.

### 3.2.2 Hipótese do Contínuo

Segundo Cengel e Cimbala (2015), apesar de os fluidos serem formados por partículas em constante movimento, sua modelagem direta é inviável devido à quantidade elevada dessas partículas. Assim, é adotada a hipótese do meio contínuo, que desconsidera a estrutura molecular e trata o fluido como homogêneo, com propriedades definidas de forma contínua em todo o domínio. Essa suposição é fundamental para a formulação das equações da mecânica dos fluidos, como as de Navier-Stokes, permitindo seu uso prático.

### 3.2.3 Algumas Propriedades dos Fluidos

As propriedades dos fluidos caracterizam o sistema e, segundo Cengel e Cimbala (2015), classificam-se em intensivas e extensivas. As intensivas, como temperatura, pressão e densidade, independem da quantidade de matéria e permanecem constantes mesmo com a divisão do sistema. Já as extensivas, como massa, volume e momento, variam com a quantidade de matéria e são aditivas. A seguir, são apresentadas as propriedades essenciais para o desenvolvimento desta tese.

#### 3.2.3.1 Densidade ou Massa Específica

A densidade  $\rho$ , ou massa específica, é uma propriedade intensiva. Conforme Fox e McDonald (1998), define-se como o quociente entre a massa  $m$  (em  $kg$ ) e o volume  $V$  (em  $m^3$ ):

$$\rho = \frac{m}{V}. \quad (3.3)$$

Sua unidade é  $kg/m^3$ , e o valor permanece constante para um mesmo material sob condições uniformes.

#### 3.2.3.2 Viscosidade

Segundo Hibbeler (2017), a viscosidade é uma propriedade dos fluidos que mede a resistência interna ao movimento ou à fluidez entre camadas adjacentes quando uma tensão

de cisalhamento é aplicada. Por ser dependente das características intrínsecas do fluido, a viscosidade é considerada uma propriedade intensiva.

Conforme Cengel e Cimbala (2015), a viscosidade resulta das forças de coesão entre as moléculas nos líquidos e das colisões entre as moléculas nos gases. Nenhum fluido é completamente isento de viscosidade (CENGEL; CIMBALA, 2015). Por exemplo, a água apresenta baixa viscosidade (aproximadamente  $1.0 \text{ mPa} \cdot \text{s}$  a  $20^\circ\text{C}$ ), enquanto o mel tem viscosidade muito maior. Além disso, a viscosidade varia com a temperatura, como no caso do óleo de motor, que se torna menos viscoso com o aumento da temperatura.

Na Figura 16, supondo que a placa superior se mova com velocidade constante  $v$  (em  $\text{m/s}$ ), proporcional à área da placa, a equação 3.2 pode ser expressa, segundo Fox e McDonald (1998), da seguinte forma:

$$\tau = \frac{F}{A} = \mu \frac{dv}{dy}, \quad (3.4)$$

onde  $\frac{dv}{dy}$  (em  $\text{s}^{-1}$ ) é a taxa de deformação do fluido devido à tensão de cisalhamento  $\tau$  (em  $\text{Pa}$ ) e  $\mu$  é o coeficiente de viscosidade ou viscosidade dinâmica, expresso em  $\text{Pa} \cdot \text{s}$  (ou  $\text{N} \cdot \text{s}/\text{m}^2$ ).

A razão entre a viscosidade dinâmica  $\mu$  (em  $\text{Pa} \cdot \text{s}$ ) e a densidade  $\rho$  (em  $\text{kg}/\text{m}^3$ ) é chamada de viscosidade cinemática  $\nu$ , expressa em  $\text{m}^2/\text{s}$ , e é definida, conforme Cengel e Cimbala (2015), pela equação:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}. \quad (3.5)$$

### 3.2.3.3 Pressão

Segundo Cengel e Cimbala (2015), a pressão é uma grandeza que descreve a força exercida sobre um fluido, seja ele estático ou em movimento. Nos fluidos, a pressão é definida como a força perpendicular aplicada sobre uma superfície por unidade de área. Nos sólidos, o conceito correspondente é a tensão normal, que também mede a força perpendicular por unidade de área (CENGEL; CIMBALA, 2015). Assim, se  $F_n$  (em  $\text{N}$ ) representa o campo de forças normais sobre uma superfície de área  $A$  (em  $\text{m}^2$ ), e  $dF_n$  é a força normal sobre uma pequena área  $dA$ , a pressão em um ponto é dada por:

$$p = \frac{dF_n}{dA}, \quad (3.6)$$

onde  $p$  é a pressão, medida em  $Pa$  ( $N/m^2$ ).

A pressão é uma propriedade intensiva, pois permanece constante independentemente da quantidade de fluido ou do volume do sistema.

#### 3.2.3.4 *Compressibilidade*

Segundo Munson, Young e Okiishi (1995), a compressibilidade é uma propriedade intensiva que descreve a variação do volume de um fluido em resposta a mudanças na pressão. Ela mede a capacidade de um fluido de ser comprimido ou expandido quando submetido a forças externas. Gases, devido à maior distância entre suas moléculas, apresentam alta compressibilidade, enquanto líquidos, com moléculas mais próximas, possuem baixa compressibilidade.

#### 3.2.3.5 *Tensão Superficial*

A tensão superficial faz com que a camada externa de um líquido se comporte como uma membrana elástica, devido às forças intermoleculares que atuam paralelamente à superfície (CENGEL; CIMBALA, 2015). Essa propriedade intensiva quantifica a energia necessária para aumentar a área superficial do líquido, permanecendo constante em diferentes regiões, desde que as condições, como temperatura e composição, sejam uniformes (CENGEL; CIMBALA, 2015). O fenômeno ocorre pela coesão desigual entre as moléculas na superfície, que são atraídas para o interior do líquido (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 1996).

### 3.2.4 **Classificação dos Fluidos**

Os fluidos podem ser classificados de várias formas, com base em suas propriedades e na resposta a forças externas. A seguir, apresentam-se as principais classificações de fluidos relevantes para esta tese.

#### 3.2.4.1 *Com Base na Viscosidade*

Segundo Fox e McDonald (1998), a equação 3.4 descreve a lei de Newton da viscosidade unidimensional. Fluidos newtonianos têm a taxa de deformação  $\left(\frac{dv}{dy}\right)$  diretamente proporcional à tensão de cisalhamento  $\tau$ , com o coeficiente de viscosidade dinâmica  $\mu$  constante e

independente da taxa de deformação. Exemplos incluem água, ar, óleo mineral e gasolina, que apresentam comportamento linear e previsível diante de tensões aplicadas. Essa definição foi introduzida por Isaac Newton em 1687 (FOX; MCDONALD, 1998).

Fluidos que não seguem a relação linear de viscosidade são classificados como não newtonianos (FOX; MCDONALD, 1998). A viscosidade desses fluidos depende da taxa de deformação, podendo variar de forma não linear, como o aumento, diminuição ou até a formação de estruturas temporárias. Exemplos incluem maionese, sangue e misturas de amido de milho em água (FOX; MCDONALD, 1998).

A viscosidade é fundamental na adesão bacteriana e formação de biofilmes (FABBRI; STOODLEY, 2016). Fluidos newtonianos, como água e óleo mineral, possuem viscosidade constante, facilitando o estudo das interações bacterianas em sistemas biológicos e industriais (FABBRI; STOODLEY, 2016). Já fluidos não newtonianos, como sangue e misturas de amido, têm viscosidade variável, o que pode influenciar a adesão bacteriana e a formação de biofilmes (FABBRI; STOODLEY, 2016). Estudar esses fluidos é essencial para entender esses fenômenos e suas aplicações em biomedicina e engenharia.

#### 3.2.4.2 *Com base na Compressibilidade*

De acordo com Munson, Young e Okiishi (1995), os fluidos podem ser classificados como compressíveis ou incompressíveis com base na variação de sua densidade em resposta a mudanças de pressão. Fluidos compressíveis, como os gases, possuem densidade que varia significativamente com a pressão. Isso é relevante em aplicações como aerodinâmica e transporte de gás, onde as propriedades do fluido, como o ar, mudam substancialmente sob diferentes condições.

Fluidos incompressíveis têm densidade praticamente constante, com uma compressibilidade tão pequena que pode ser ignorada em muitas análises. Isso simplifica as equações de movimento e é comum em escoamentos de líquidos, como água e óleo hidráulico, onde a variação de densidade é insignificante em condições normais (MUNSON; YOUNG; OKIISHI, 1995).

A distinção entre compressibilidade e incompressibilidade é fundamental para a formulação das equações governantes, como as equações de Navier-Stokes, e para o desenvolvimento de modelos que representem o comportamento dos fluidos em diferentes contextos. Essa diferenciação também afeta diretamente a dinâmica das bactérias e a formação de biofilmes (PICIOREANU et al., 2018). Fluidos incompressíveis, como a água, são comuns em sistemas

biológicos e industriais, permitindo uma modelagem simplificada com densidade constante (PICIOREANU et al., 2018). Já os fluidos compressíveis, como os gases, têm densidade variável, o que impacta o transporte de nutrientes e oxigênio, essenciais para o crescimento de biofilmes, além de influenciar o movimento bacteriano (PICIOREANU et al., 2018). Compreender essas diferenças é essencial para estudar a adesão bacteriana e modelar a formação de biofilmes.

#### 3.2.4.3 *Com Base na Presença de Sólidos Suspensos*

Segundo Shui, Eijkel e Berg (2007), os fluidos classificam-se em monofásicos ou multifásicos conforme a presença de mais de uma fase. Fluidos multifásicos contêm partículas sólidas, gotículas ou bolhas em suspensão, como ocorre em lamas, emulsões e misturas gás-sólido. Suas propriedades resultam da interação entre as fases, o que torna sua análise mais complexa. Esses fluidos são amplamente aplicados em processos industriais, transporte de sedimentos, engenharia de petróleo e controle de poluição.

Fluidos multifásicos, por conterem partículas, gotículas ou bolhas dispersas em uma fase contínua, apresentam comportamento mais complexo que os monofásicos (SHUI; EIJKEL; BERG, 2007). Suas propriedades dependem das interações entre as fases, exigindo modelagens mais elaboradas. São amplamente empregados em aplicações industriais, no transporte de sedimentos, na engenharia de petróleo e em sistemas de controle de poluição.

A distinção entre fluidos monofásicos e multifásicos é fundamental para o estudo da adesão bacteriana e da formação de biofilmes. Fluidos multifásicos favorecem esses processos ao oferecerem interfaces adicionais, como fluido-sólido e fluido-fluido, que servem de suporte para a adesão bacteriana (SHUI; EIJKEL; BERG, 2007). Em sistemas de tratamento de águas residuais, por exemplo, partículas sólidas suspensas frequentemente atuam como substratos para biofilmes em ambientes dinâmicos (SHUI; EIJKEL; BERG, 2007).

Partículas e gotículas em fluidos multifásicos podem modificar a rugosidade e a energia superficial, favorecendo a adesão bacteriana (SHUI; EIJKEL; BERG, 2007). Além disso, esses fluidos influenciam o transporte de nutrientes e oxigênio, afetando diretamente o metabolismo e a proliferação bacteriana, fatores essenciais para o crescimento de biofilmes (SHUI; EIJKEL; BERG, 2007).

Fluidos monofásicos, por sua homogeneidade, são amplamente empregados em estudos controlados sobre biofilmes. Permitem a análise isolada de variáveis como viscosidade, tensão superficial e composição química, auxiliando no desenvolvimento de estratégias de controle da

adesão bacteriana (SHUI; EIJKEL; BERG, 2007).

Compreender a classificação entre fluidos monofásicos e multifásicos mostra-se essencial para análises científicas e aplicações em contextos industriais, ambientais e biomédicos. Tal entendimento possibilita enfrentar desafios e explorar oportunidades associadas à formação e ao controle de biofilmes em sistemas fluídicos (SHUI; EIJKEL; BERG, 2007).

### 3.3 MECÂNICA DOS FLUIDOS

Segundo Fox e McDonald (1998), a Mecânica dos Fluidos estuda o comportamento de fluidos em repouso ou movimento sob a ação de forças. Também abrange as interações entre fluidos e superfícies sólidas ou entre diferentes fluidos nas interfaces (CENGEL; CIMBALA, 2015). De acordo com Hibbeler (2017), essa área divide-se em três ramos: Hidrostática, Cinemática e Dinâmica dos Fluidos.

Esta tese concentra-se na Dinâmica dos Fluidos, que analisa o movimento dos fluidos e as forças envolvidas nesse processo. Tal abordagem é essencial para compreender a adesão bacteriana, uma vez que o escoamento, as forças de cisalhamento e a distribuição de pressão nas interfaces afetam diretamente essa interação, influenciando a formação de biofilmes.

A análise fundamenta-se nas equações governantes da Dinâmica dos Fluidos — continuidade e momento — sendo a equação da energia desconsiderada, por não envolvermos fenômenos térmicos. Essas equações oferecem a base para modelar a interação fluido-bactéria e compreender os mecanismos que regem o processo de adesão.

#### 3.3.1 Tipos de Escoamentos

Os escoamentos de fluidos classificam-se segundo diferentes propriedades e parâmetros que afetam diretamente seu comportamento e a interação com superfícies. Para os objetivos desta tese, são destacados os tipos de escoamento mais relevantes à adesão bacteriana e à formação de biofilmes.

##### 3.3.1.1 *Escoamentos Viscosos e Não Viscosos*

O escoamento é classificado como viscoso quando os efeitos da viscosidade influenciam significativamente o movimento do fluido (CENGEL; CIMBALA, 2015). Esse fator afeta direta-

mente as forças de cisalhamento na interface fluido-sólido, influenciando a adesão bacteriana e a formação de biofilmes. Em contrapartida, considera-se um escoamento não viscoso quando os efeitos da viscosidade são desprezíveis frente às forças inerciais e de pressão, como pode ocorrer em fluidos de baixa viscosidade, a exemplo do ar (CENGEL; CIMBALA, 2015). Embora não existam fluidos com viscosidade nula, em certas condições a viscosidade pode ser desconsiderada na análise (CENGEL; CIMBALA, 2015). Compreender esses efeitos é essencial para avaliar a influência da viscosidade no comportamento bacteriano e na adesão a superfícies.

### 3.3.1.2 *Escoamentos Laminares, Turbulentos e Transitórios*

Segundo Fox e McDonald (1998), o escoamento laminar caracteriza-se pelo movimento ordenado das partículas em camadas paralelas, comum em fluidos de baixa velocidade ou alta viscosidade. Já o escoamento turbulento, conforme (CENGEL; CIMBALA, 2015), envolve movimento desordenado, com flutuações de velocidade e formação de vórtices. Entre esses dois regimes, pode ocorrer escoamento transitório, com características intermediárias, dependendo das condições do fluxo. A identificação do regime de escoamento é fundamental para esta tese, pois influencia as forças de cisalhamento e a distribuição de nutrientes, impactando diretamente a adesão bacteriana e a formação de biofilmes.

### 3.3.1.3 *Escoamentos Incompressíveis, Compressíveis e Fracamente Compressíveis*

Conforme Cengel e Cimbala (2015), o escoamento incompressível ocorre quando a densidade do fluido permanece constante, como em líquidos (ex: água em sistemas hidráulicos), onde as variações de pressão não afetam significativamente a densidade. Em contraste, no escoamento compressível, como em gases (ex: ar), a densidade varia substancialmente com as mudanças de pressão. Existe também o escoamento fracamente compressível, típico de fluidos como óleo em alta pressão, onde a densidade muda de forma sutil, podendo ser desconsiderada em muitas análises.

Essa classificação é crucial para escolher as equações adequadas para cada tipo de escoamento, uma vez que os modelos de escoamento compressível ou fracamente compressível incorporam a variação de densidade, enquanto escoamentos incompressíveis simplificam essa consideração (CENGEL; CIMBALA, 2015). Para o estudo da adesão bacteriana e formação de biofilmes, entender essas diferenças é essencial, pois a variação de densidade afeta o transporte

de nutrientes e a interação bacteriana com as superfícies.

#### 3.3.1.4 *Escoamentos Uni, Bi e Tridimensionais*

Os escoamentos podem ser classificados como unidimensionais, bidimensionais ou tridimensionais, dependendo das direções espaciais em que a velocidade do fluido varia. No escoamento unidimensional, a velocidade varia em uma direção, simplificando a análise (CENGEL; CIMBALA, 2015). No escoamento bidimensional, a velocidade varia em duas direções, aumentando a complexidade (CENGEL; CIMBALA, 2015). O escoamento tridimensional ocorre quando a velocidade varia nas três direções espaciais, sendo o mais complexo (CENGEL; CIMBALA, 2015).

Essa classificação é importante para definir a complexidade do modelo necessário para analisar o comportamento do escoamento e sua interação com superfícies e partículas. No estudo da adesão bacteriana e formação de biofilmes, essa diferença é relevante, pois a variação da velocidade nas diferentes direções pode afetar as forças de cisalhamento nas superfícies, influenciando a adesão e o crescimento bacteriano.

#### 3.3.2 **Condições de Contorno**

As condições de contorno são essenciais na análise de escoamento de fluidos, pois determinam a interação do fluido com as superfícies, afetando seu comportamento e sendo cruciais para a solução das equações que descrevem seu movimento (CENGEL; CIMBALA, 2015).

De acordo com Cengel e Cimbala (2015), as condições de contorno podem ser descritas da seguinte forma: a condição de contorno de parede estabelece que o fluido não pode atravessar a parede, e que a velocidade na direção normal à superfície é nula. Na condição de não escorregamento, a velocidade do fluido na superfície é igual à da parede. A condição de contorno de interface descreve o comportamento da velocidade, da pressão e da tensão de cisalhamento na interface entre dois fluidos, assegurando uma transição contínua entre eles. Por fim, a condição de contorno de superfície livre aplica-se às interfaces entre um fluido e um gás ou vácuo, onde a pressão na superfície do fluido é igual à pressão do ambiente externo, e a tensão superficial atua para minimizar a área da superfície livre. Essas condições são fundamentais para modelar escoamentos, especialmente no estudo da adesão bacteriana, em que a interação fluido-superfície impacta diretamente as forças de adesão e a formação de biofilmes.

### 3.3.3 Leis Básicas

Para estudar a Dinâmica dos Fluidos, é essencial compreender as leis fundamentais que regem o movimento dos fluidos, como a Lei da Conservação da Massa, a Segunda Lei de Newton, a Lei da Conservação da Quantidade de Movimento Angular, e as Leis da Termodinâmica (HIBBELER, 2017). Essas leis formam a base para modelar o comportamento dos fluidos, sendo expressas como equações diferenciais (DATE, 2005). Em alguns casos, equações adicionais, como as de estado, podem ser necessárias, mas encontrar soluções analíticas é desafiador, especialmente em problemas complexos (LIU; LIU, 2003).

Essas leis são cruciais para o estudo da adesão bacteriana e formação de biofilmes, pois a dinâmica do fluido influencia as forças de adesão entre as bactérias e as superfícies. A aplicação das leis de conservação, como as da massa e do movimento, permite modelar essas interações, impactando as forças de cisalhamento e a distribuição de pressão, que determinam a adesão e a formação de biofilmes.

### 3.3.4 Sistema e Volume de Controle

Os conceitos de sistema e volume de controle são fundamentais para a análise dos escoamentos de fluidos, estando diretamente relacionados às leis básicas da Mecânica dos Fluidos. De acordo com Fox e McDonald (1998), um sistema é uma quantidade fixa e identificável de massa que é acompanhada ao longo do tempo, com a restrição de que o fluido não pode escapar, embora o volume do sistema possa variar. Nesse tipo de sistema, apenas energia, na forma de calor ou trabalho, pode ser transferida para dentro ou fora, caracterizando um sistema fechado. Segundo os autores, o volume de controle, ou sistema aberto, refere-se a um sistema no qual a quantidade de massa pode variar, permitindo a entrada e saída de fluido. Esse volume pode ter fronteiras fixas ou móveis, e envolve, além da troca de massa, a transferência de calor e trabalho.

Esses conceitos são cruciais no estudo da adesão bacteriana e formação de biofilmes, pois a definição de um sistema ou volume de controle adequado permite modelar as condições de fluxo e as trocas de massa e energia que afetam a dinâmica da adesão bacteriana às superfícies e o crescimento de biofilmes. A escolha do volume de controle é, portanto, essencial para a simulação das interações entre fluidos e partículas biológicas.

### *3.3.4.1 Abordagens Lagrangiana e Euleriana*

Na Mecânica dos Fluidos, os movimentos de fluidos e partículas podem ser descritos por duas abordagens principais: a lagrangiana e a euleriana (CENGEL; CIMBALA, 2015).

#### **3.3.4.1.1 Abordagem Euleriana**

A abordagem euleriana, conforme descrito por Liu e Liu (2003), caracteriza o movimento do fluido de forma espacial, utilizando um sistema de coordenadas fixo. Nela, as propriedades do fluido são analisadas em pontos específicos do espaço, sem o acompanhamento das partículas individuais. As variáveis de campo, como a velocidade e a pressão, são expressas como funções do tempo e da posição em um volume de controle. Essa abordagem é comumente utilizada em análises de escoamentos em larga escala, como em sistemas hidráulicos ou aerodinâmicos, onde o foco está no comportamento global do fluido (SHADLOO; OGER; TOUZÉ, 2016).

#### **3.3.4.1.2 Abordagem Lagrangiana**

A abordagem lagrangiana, conforme explicada por Liu e Liu (2003), acompanha o movimento individual das partículas do fluido. Utilizando um sistema de coordenadas móveis, as propriedades do campo se deslocam com as partículas, preservando suas características ao longo do tempo (SHADLOO; OGER; TOUZÉ, 2016). Nesse modelo, o escoamento é descrito pelo acompanhamento das trajetórias de partículas específicas, com suas posições e velocidades sendo funções do tempo. Essa abordagem é particularmente útil para estudar fenômenos que envolvem o comportamento das partículas, como a interação de células bacterianas com superfícies, permitindo um rastreamento preciso do movimento das bactérias.

## 4 MÉTODO DA HIDRODINÂMICA DE PARTÍCULAS SUAVIZADAS (SPH)

### 4.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta os conceitos fundamentais de Modelagem Matemática e Computacional, Simulação Numérica e CFD, com foco nos métodos numéricos baseados em malha e sem malha. Dá-se ênfase ao método de partículas sem malha, em especial ao SPH, adotado nesta tese. Inicialmente, é introduzida a formulação básica do SPH, seguida da análise das equações governantes relevantes, como a equação da continuidade e a equação do momento, com destaque para as equações de Navier-Stokes.

### 4.2 MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

Como abordado no Capítulo 3, a modelagem matemática da Mecânica dos Fluidos baseia-se em cinco leis físicas essenciais (HIBBELER, 2017), expressas como Equações Diferenciais Parciais (EDP)'s. O principal desafio é encontrar soluções numéricas para essas equações.

A aplicação dessas leis depende das características do sistema em questão, embora nem todas sejam necessárias para resolver um problema específico (FOX; MCDONALD, 1998). As equações de estado e/ou constitutivas são essenciais para garantir a consistência do modelo, descrevendo as propriedades mecânicas e termodinâmicas dos fluidos e permitindo a formulação do tensor de tensões em função do campo de velocidade e pressão (CENGEL; CIMBALA, 2015).

A simulação numérica é fundamental, pois discretiza as EDP's e possibilita a resolução de problemas complexos (LIU; LIU, 2003).

#### 4.2.1 Simulação Numérica Computacional

A simulação numérica computacional é crucial para resolver problemas complexos, frequentemente superando os métodos experimentais tradicionais (LIU; LIU, 2003). Ela permite uma análise abrangente do problema e, com o avanço do poder computacional, fornece resultados precisos que refletem fenômenos físicos. Além disso, auxilia na validação de teorias, complementação de dados experimentais e compreensão de novos fenômenos.

Conforme Liu e Liu (2003), a simulação envolve etapas como formulação do problema, discretização do domínio, implementação computacional, resolução das equações numéricas,

validação dos resultados e interpretação dos dados, sendo essas essenciais para obter conclusões precisas sobre o fenômeno estudado.

## **4.2.2 Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)**

A resolução de problemas em Mecânica dos Fluidos frequentemente exige métodos numéricos, pois a solução analítica é rara, como destacado por Liu e Liu (2003). A escolha do método depende do problema, com a CFD se destacando como uma abordagem moderna que utiliza códigos computacionais para analisar o comportamento dos fluidos (GAO et al., 2022).

Segundo Gao et al. (2022), a CFD aplica técnicas avançadas para modelar escoamentos complexos com base nas leis da Mecânica dos Fluidos, fornecendo soluções numéricas aproximadas que facilitam a análise e resolução de problemas fluidodinâmicos.

### *4.2.2.1 Métodos Numéricos*

Os métodos numéricos são técnicas matemáticas desenvolvidas para fornecer soluções aproximadas a problemas complexos ou impossíveis de resolver de forma exata por métodos analíticos tradicionais (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016).

#### **4.2.2.1.1 Métodos com Malha**

Métodos com malha dividem o domínio em elementos pequenos para aproximar soluções de equações diferenciais (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016). Técnicas como método das Diferenças Finitas (FDM), método de Elementos Finitos (FEM) e método dos Volumes Finitos (FVM) resolvem as equações de Navier-Stokes, mas têm limitações em problemas com grandes deformações ou superfícies livres (GAO et al., 2022). Embora simples, esses métodos enfrentam desafios em domínios irregulares ou que exigem alta precisão (NIRAULA; HAN; WANG, 2015).

Na abordagem euleriana, a malha fixa facilita as equações, mas exige remalhamento para ajustes durante a simulação (PADOVA; MOSSA, 2020). Métodos eulerianos têm limitações em geometrias irregulares e rastreamento temporal (LIU; LIU, 2003). Métodos lagrangianos, comuns na Mecânica dos Sólidos, acompanham o movimento da malha, sendo mais adequados para geometrias complexas, mas também enfrentam distorção da malha, necessitando remalhamento (LIU; LIU, 2003).

#### **4.2.2.1.2 Métodos sem Malha**

Métodos sem malha foram desenvolvidos para superar as limitações dos métodos tradicionais, oferecendo aproximações com nós distribuídos arbitrariamente (NGUYEN et al., 2008). Aplicáveis tanto em Mecânica dos Sólidos quanto em Dinâmica dos Fluidos, incluem SPH, método de Galerkin Livre de Elementos (EFGM), método de Partícula Kernel Reproduzido (RKPM), método de Petrov-Galerkin Local sem Malha (MLPG), método de Interpolação de Pontos (PIM) e método da Forma Fraca-Forte Livre de Malha (MWS) (LIU; LIU, 2003).

Esses métodos, que não dependem de malhas pré-definidas, utilizam pontos ou partículas distribuídas livremente, sendo vantajosos para problemas com geometrias complexas, superfícies livres e grandes deformações. Embora ofereçam maior flexibilidade e eficiência, podem apresentar altos custos computacionais e desafios de interpolação (LIU; LIU, 2003). Métodos sem malha eulerianos, como MLPG e EFGM, utilizam pontos fixos no espaço, enquanto métodos lagrangianos, como SPH, RKPM, PIM e MWS, são eficazes para modelar escoamentos com fluidos descontínuos e geometrias complexas (PADOVA; MOSSA, 2020).

#### **4.2.2.1.3 Métodos de Partículas sem Malha (MPM)'s**

Os métodos de Partículas Sem Malha (MPM)'s simulam sistemas como partículas para evitar problemas com malhas e controlar a evolução de sistemas fluido-partícula (LIU; LIU, 2003). Exemplos incluem o método de Dinâmica Molecular (MD), método da Simulação Direta Monte Carlo (DSMC), método de Dinâmica de Partículas Dissipativas (DPD), método Semi-implícito de Partículas Móveis (MPS), método de Elemento Difuso (DEM), o método de Vórtice e o método SPH (SHADLOO; OGER; TOUZÉ, 2016).

O método SPH, lagrangiano sem malha, é eficaz na simulação de problemas em Dinâmica dos Fluidos, especialmente em cenários com deformações não lineares e interações complexas (PADOVA; MOSSA, 2020). Escolhido nesta tese por sua versatilidade, o SPH não requer malhas estruturadas e é eficiente em problemas com superfícies livres, interfaces móveis e fronteiras deformáveis (SHADLOO; OGER; TOUZÉ, 2016). O método usa a aproximação de funções de campo por representação integral, garantindo precisão e flexibilidade em geometrias complexas e escoamentos multifásicos (LIU; LIU, 2003), (BAGHERI; MOHAMMADI; RIAZI, 2023).

### 4.3 HIDRODINÂMICA DE PARTÍCULAS SUAVIZADAS (SPH)

O método SPH é uma técnica lagrangiana sem malha que representa o fluido como um conjunto de partículas móveis, cuja dinâmica é regida pelas equações hidrodinâmicas de movimento (LIU; LIU, 2003). As propriedades físicas são obtidas por interpolação com base nas partículas vizinhas, e as leis de conservação são expressas como somas discretas (LIU; LIU, 2003). Essa abordagem elimina a necessidade de malhas fixas, facilitando a simulação de escoamentos com geometrias complexas, superfícies livres e interfaces móveis (LIU; LIU, 2003).

Considerada uma técnica simples, eficiente e versátil, o SPH é amplamente aplicado em mecânica dos sólidos, dinâmica dos fluidos e em diferentes escalas, do microscópico ao astronômico (VIOLEAU; ROGERS, 2016). Sua principal vantagem reside na flexibilidade, pois não impõe restrições à geometria do sistema nem à evolução do problema, facilitando a implementação de diversos processos físicos (VIOLEAU; ROGERS, 2016). Desde sua introdução, tem sido utilizado em simulações de escoamentos com grandes deformações, como a quebra de ondas e inundações causadas por tsunamis (LIU; LIU, 2003).

A representação integral das funções é feita por meio da aproximação por kernel, o que proporciona estabilidade matemática ao suavizar as soluções (LIU; LIU, 2003). As interações entre partículas são determinadas por uma função de suavização  $W$ , que depende da distância entre partículas e de um comprimento de suavização  $h$ . O raio de influência de cada partícula é definido por  $kh$ , onde  $k$  é uma constante associada ao kernel (LIU; LIU, 2003). As partículas acompanham o movimento do fluido e obedecem às EDP's que descrevem sua dinâmica (GOMEZ-GESTEIRA et al., 2010), ajustando localmente propriedades como densidade e pressão conforme as condições do escoamento (BAGHERI; MOHAMMADI; RIAZI, 2023).

Após a aproximação por kernel, as equações são discretizadas por somatórios, resultando em Equações Diferenciais Ordinárias (EDO)'s resolvidas de forma iterativa (LIU; LIU, 2003). Esse processo dispensa malhas fixas e permite o uso de algoritmos explícitos de integração no tempo, garantindo eficiência computacional e estabilidade numérica (LIU; LIU, 2003).

Apesar de suas vantagens, o SPH ainda apresenta limitações que afetam sua precisão e aplicabilidade (BAGHERI; MOHAMMADI; RIAZI, 2023). Entre elas, destacam-se a perda de consistência entre partículas, a complexidade na imposição de condições de contorno (SHADLOO; OGER; TOUZÉ, 2016), (AKINCI et al., 2012) e a instabilidade gerada pela desordem na distribuição das partículas, especialmente em casos com grandes deformações ou interfaces complexas (MONAGHAN, 2005).

A obtenção de gradientes no SPH exige correções para derivadas de primeira ordem e, em problemas complexos, técnicas mais elaboradas para derivadas superiores (LIU; LIU, 2003). O passo de tempo, limitado pela velocidade do som, também impacta a eficiência computacional quando comparado a métodos baseados em malha.

Funções kernel com simetria esférica são amplamente utilizadas por favorecerem a interpolação entre partículas e contribuírem para a estabilidade das simulações. A eficácia do método, no entanto, depende da distribuição isotrópica dos vizinhos (LIU; LIU, 2003). Em contextos com geometrias anisotrópicas, como na modelagem astrofísica de discos ou folhas, essa configuração pode tornar-se inadequada, exigindo adaptações na formulação.

### 4.3.1 Formulação Básica

Um dos maiores desafios na modelagem numérica é a transição do contínuo para o discreto, como no SPH, que aproxima funções de campo e suas derivadas nas equações de movimento (VIOLEAU, 2012). No SPH, o contínuo é representado por partículas, cada uma com propriedades como volume, massa, momento, temperatura e concentração (SHADLOO; OGER; TOUZÉ, 2016). Segundo Liu e Liu (2003), o método envolve duas etapas principais: Aproximação Kernel e Aproximação por Partículas.

#### 4.3.1.1 Aproximação Kernel

A aproximação kernel, conforme discutido por Violeau (2012), representa uma função arbitrária  $f$  por meio de uma integral de convolução com a função delta de Dirac  $\delta$ , conforme a equação:

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x')\delta(x' - x)dx', \quad (4.1)$$

onde  $\Omega$  é o volume do domínio e  $dx'$  é o elemento de volume diferencial.

A função delta de Dirac é definida por:

$$\delta(x' - x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x = x' \\ 0, & \text{se } x \neq x'. \end{cases}, \quad (4.2)$$

Essa função é aproximada por uma função de suavização  $W(x' - x, h)$ , com  $h$  sendo o parâmetro já definido anteriormente. A aproximação kernel é, então, dada pela convolução:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{\Omega} f(x')W(x' - x, h)dx', \quad (4.3)$$

onde a operação de convolução entre  $f(x')$  e  $W(x' - x, h)$  resulta na aproximação de  $f(x)$ .

Na representação integral de  $f$ , ao usar a função delta de Dirac, a equação (4.1) é exata para funções bem definidas e contínuas. Contudo, ao substituir  $\delta$  por  $W$ , como mostrado na equação (4.3), obtemos uma aproximação de  $f$  por convolução, o que resulta em uma perda de exatidão, mas mantém a precisão necessária para o SPH.

#### 4.3.1.1.1 Funções Kernel de Suavização

De acordo com Liu e Liu (2003), as funções kernel de suavização são essenciais para a aproximação das funções e para a definição do domínio de suporte das partículas, garantindo a consistência e a precisão do método. Uma função  $W$  é considerada uma função kernel de suavização se atender às seguintes propriedades (SHADLOO; OGER; TOUZÉ, 2016):

1. **Normalização:** A função kernel deve ser normalizada, ou seja, a integral da função kernel sobre todo o domínio deve ser igual a 1:

$$\int_{\Omega} W(x' - x, h)dx' = 1;$$

2. **Suporte Compacto:** Após a aproximação kernel, a integração é localizada. A função  $f(x)$  depende apenas dos valores de  $f$  nos pontos onde  $W(x' - x, h)$  é diferente de zero. O domínio de integração  $\Omega$  representa o domínio de suporte, e  $W(x' - x)$  se anula quando a distância  $|x' - x|$  excede um valor proporcional ao comprimento de suavização  $h$ . Assim,

$$W(x' - x, h) = 0, \text{ se } |x' - x| > kh, k > 0;$$

onde  $k$  é uma constante definida como anteriormente, que define a área efetiva do suporte  $\Omega$ ;

3. **Positividade:** A função kernel deve ser não negativa sobre o domínio  $\Omega$ , ou seja,  $W(x' - x, h) \geq 0$ , para todos os pontos dentro do domínio;

4. **Monotonicidade decrescente:** A função kernel deve ser monotônica decrescente em relação à distância entre os pontos. Ou seja,  $W(x' - x, h)$  deve ser menor para pontos mais distantes, ou seja,  $W(x' - x, h) < W(x' - y, h)$ , se  $|x' - x| > |x' - y|$ ;
5. **Função delta de Dirac:** À medida que o comprimento de suavização  $h$  se aproxima de zero, a função kernel deve se aproximar da função delta de Dirac. Em outras palavras,

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(x' - x, h) = \delta(x' - x);$$

6. **Simetria:** A função kernel de suavização deve ser esfericamente simétrica, ou seja, ela deve depender apenas da distância entre os pontos  $x$  e  $x'$ , e ser igual para  $x$  e  $-x'$ , o que corresponde a

$$W(|x' - x|, h) = W(-|x' - x|, h);$$

7. **Suavidade:** A função kernel deve ser suavemente diferenciável, ou seja, a função deve ser diferenciável de forma suave para garantir uma interpolação precisa. Dessa forma, a convolução da função kernel com outras funções também deve ser suavemente diferenciável. Assim, a função deve satisfazer a condição  $W(x' - x, h) \in C^n, n > 1$ .

A quinta propriedade torna-se desnecessária se todas as quatro primeiras forem satisfeitas (BELYTSCHKO et al., 1996).

#### 4.3.1.1.2 Erros da Aproximação Kernel

De acordo com Liu e Liu (2003), os erros da aproximação kernel podem ser analisados a partir da expansão de Taylor da função  $f(x')$  em torno de  $x$ , assumindo que  $f(x)$  seja diferenciável. A expansão de Taylor é dada por:

$$f(x) = \int_{\Omega} [f(x) + f'(x)(x' - x) + r((x' - x)^2)] W(x' - x, h) dx', \quad (4.4)$$

onde  $r$  é o termo residual e  $\Omega$  representa o domínio de integração.

Reorganizando a expressão para destacar as contribuições dos diferentes termos, temos:

$$f(x) = f(x) \int_{\Omega} W(x' - x, h) dx' + f'(x) \int_{\Omega} (x' - x) W(x' - x, h) dx' + r(h^2). \quad (4.5)$$

Se as propriedades das funções kernel, como normalização e suporte compacto, forem atendidas, o erro da aproximação pode ser estimado como de segunda ordem. Ou seja, o erro  $F(x)$  na aproximação kernel é dado por:

$$F(x) = f(x) + r(h^2), \quad (4.6)$$

onde  $r(h^2)$  é um erro de ordem  $h^2$ , que diminui conforme o comprimento de suavização  $h$  diminui. Esse erro mostra que a precisão da aproximação melhora à medida que o parâmetro de suavização é refinado, embora sempre exista uma margem de erro associada à discretização.

#### 4.3.1.2 Aproximação por Partículas

Conforme Liu e Liu (2003), no SPH, a representação integral das funções e derivadas é convertida em uma forma discreta por meio de somatórios. As integrais são substituídas por somas sobre as partículas vizinhas dentro do domínio de suporte  $\Omega$ . Cada partícula possui propriedades próprias, como volume e massa. Na aproximação kernel, o volume infinitesimal  $dx'$  é substituído pelo volume da partícula  $V_j$ , resultando na seguinte expressão para  $f(x)$ :

$$f(x) = \sum_j f(x_j)W(x_j - x_i, h)V_j, \quad (4.7)$$

onde  $V_j$  é o volume da partícula  $j$  e  $W_{ij} = W(x_j - x_i, h) = W(|x_j - x_i|, h) = W(x_{ij}, h)$  é a função kernel entre  $i$  e  $j$  (ver Figura 17). A partícula  $i$  é aquela onde a função  $f$  está sendo estimada, e a soma percorre todas as partículas vizinhas  $j$  dentro do suporte da função kernel.

A relação entre volume e densidade é dada por:

$$V = \frac{m}{\rho}, \quad (4.8)$$

onde  $m$  é a massa (constante) e  $\rho$  é a densidade. Assim, para cada partícula  $j$ , tem-se:

$$V_j = \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (4.9)$$

o que leva à forma discreta da função  $f(x)$ :

$$f(x) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j)W(x_j - x_i, h), \quad (4.10)$$

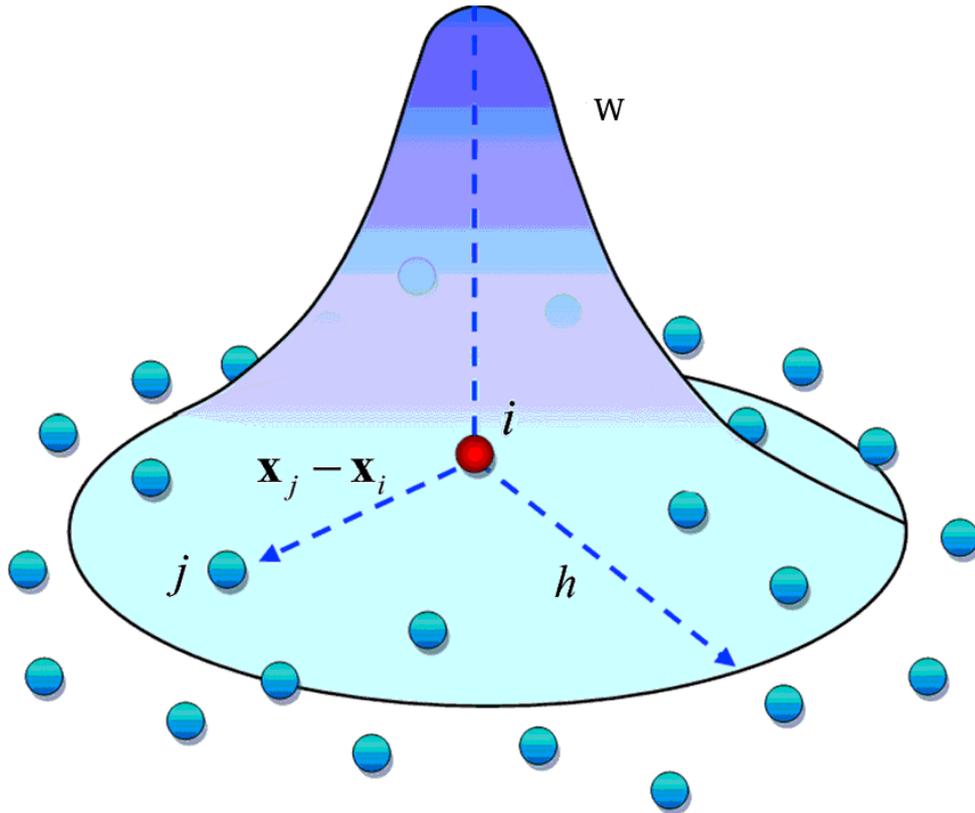


Figura 17 – Função núcleo de suavização SPH tridimensional (esquemática).

Fonte: Adaptado de (ResearchGate, 2019)

onde  $m_j$  e  $\rho_j$  são a massa e a densidade da partícula  $j$ , respectivamente (GOMEZ-GESTEIRA et al., 2010).

Adotando o índice  $i$  para a partícula central e  $j$  para as partículas vizinhas, a aproximação kernel de um campo escalar  $A$  na partícula  $i$  é dada por (LIU; LIU, 2003):

$$A(x_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} A(x_j) W_{ij}, \quad (4.11)$$

onde  $W_{ij}$  é definido com anteriormente.

O gradiente do campo escalar  $A$  em  $x_i$  é aproximado por (LIU; LIU, 2003):

$$\nabla A(x_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} A(x_j) \nabla_i W_{ij}, \quad (4.12)$$

com  $\nabla_i W_{ij} = \nabla_i W(x_j - x_i, h)$  representando o gradiente da função kernel.

Para um campo vetorial  $u$ , o divergente na partícula  $i$  é calculado por (LIU; LIU, 2003):

$$\nabla \cdot u(x_i) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} u(x_j) \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (4.13)$$

Essas expressões permitem ao método SPH calcular campos físicos e suas derivadas de forma eficiente, sendo adequadas à modelagem de diversos fenômenos contínuos.

#### 4.3.1.3 Equações Governantes

No método SPH, o fluido é representado por partículas lagrangianas, com propriedades como posição, velocidade e densidade variando ao longo do tempo (SHADLOO; OGER; TOUZÉ, 2016). As equações governantes, como a equação da continuidade e a equação do momento, são derivadas das leis fundamentais e modelam o comportamento do fluido nesta tese. A equação de Navier-Stokes, que descreve o movimento dos fluidos e incorpora as leis de conservação, é essencial na Mecânica dos Fluidos (CENGEL; CIMBALA, 2015), embora soluções exatas sejam raras devido à complexidade dos problemas práticos.

##### 4.3.1.3.1 Equação da Continuidade

A conservação da massa estabelece que a massa total de um sistema fluido permanece constante no tempo, ou seja, a massa que entra deve ser igual à que sai, sem acúmulo interno (FOX; MCDONALD, 1998). Na formulação lagrangiana, essa lei é representada pela equação da continuidade, garantindo continuidade e estabilidade na modelagem do escoamento (GOMEZ-GESTEIRA et al., 2010):

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot v = 0, \quad (4.14)$$

em que  $\rho$  é a densidade,  $v$  a velocidade e  $\frac{D}{Dt}$  a derivada material, que representa a variação de uma grandeza ao longo da trajetória de uma partícula de fluido (CENGEL; CIMBALA, 2015). Essa derivada é definida por:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla. \quad (4.15)$$

Em casos específicos, a equação da continuidade assume formas simplificadas. Para fluidos incompressíveis:

$$\nabla \cdot v = 0, \quad (4.16)$$

e para escoamentos permanentes:

$$\nabla \cdot (\rho v) = 0. \quad (4.17)$$

No SPH, a versão discretizada da equação da continuidade para a partícula  $i$  é dada por (GOMEZ-GESTEIRA et al., 2010):

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_i - v_j) \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (4.18)$$

#### 4.3.1.3.2 Equação do Momento

A conservação da quantidade de movimento, baseada na Segunda Lei de Newton, estabelece que, para um sistema fluido em movimento, a soma das forças externas é igual à variação da quantidade de movimento linear (FOX; MCDONALD, 1998). Para escoamentos compressíveis ou incompressíveis e desprezando os efeitos viscosos, a equação do momento na formulação lagrangiana é expressa por Gomez-Gesteira et al. (2010):

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\nabla p + \rho g, \quad (4.19)$$

onde  $p$  é a pressão e  $g$ , a aceleração gravitacional. Esta equação é conhecida como equação de Euler.

Conforme destacado por Gomez-Gesteira et al. (2010), muitos autores reescrevem a equação do momento utilizando a seguinte mudança de variáveis:

$$\frac{\nabla p}{\rho} = \nabla \left( \frac{p}{\rho} \right) + \frac{p}{\rho} \nabla \rho. \quad (4.20)$$

Nestas condições, a forma discretizada da equação do momento para a partícula  $i$  é expressa por (GOMEZ-GESTEIRA et al., 2010):

$$\frac{Dv_i}{Dt} = - \sum_j m_j \left( \frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} + g_i. \quad (4.21)$$

Para escoamentos compressíveis ou incompressíveis, a equação do momento na abordagem lagrangiana é formulada, segundo Cengel e Cimbala (2015), como:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho g, \quad (4.22)$$

onde  $\tau$  é o tensor das tensões viscosas.

De acordo com Liu e Liu (2003), para fluidos newtonianos, a tensão de cisalhamento é linearmente proporcional à taxa de deformação de cisalhamento. Assim, o tensor de tensões viscosas é dado por:

$$\tau = \mu \epsilon_{\alpha\beta} \quad (4.23)$$

onde

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \left[ \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \right] - \frac{2}{3} (\nabla \cdot v) \delta_{\alpha\beta}, \quad (4.24)$$

$\alpha$  e  $\beta$  representam as direções e  $\delta$  é o delta de Dirac, conforme definido anteriormente.

Ao considerarmos fluidos newtonianos com viscosidade constante e substituirmos o tensor de tensões viscosas da equação 4.24 na equação do momento Lagrangiana 4.22, obtemos, conforme Cengel e Cimbala (2015), a equação de Navier-Stokes — um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) que descreve o movimento dos fluidos e é fundamental na Mecânica dos Fluidos — dada por:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ \mu \left( \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \right) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot v) \delta_{\alpha\beta} \right] + \rho g. \quad (4.25)$$

Quando consideramos escoamentos de fluido incompressível viscoso, obtemos uma simplificação da equação de Navier-Stokes, dada por (CENGEL; CIMBALA, 2015):

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 v + \rho g, \quad (4.26)$$

onde  $\nabla^2$  representa o operador laplaciano.

## 5 ESTADO DA ARTE

### 5.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo revisa a evolução do entendimento sobre a adesão bacteriana, com ênfase na influência da rugosidade da superfície. Destaca-se a aplicação da CFD, em especial por meio de métodos sem malha, como uma ferramenta eficaz na investigação desse fenômeno. A trajetória de desenvolvimento do método SPH é apresentada, evidenciando seu papel como uma abordagem inovadora e promissora para a simulação da adesão bacteriana em superfícies rugosas.

### 5.2 ADESÃO BACTERIANA: HISTÓRICO, AVANÇOS E TENDÊNCIAS

O estudo bacteriano começou no século XVII, quando Antonie van Leeuwenhoek observou organismos microscópicos em 1676 (SCHAECHTER, 2015). No século XIX, Pasteur e Winogradsky aprofundaram o conhecimento da fisiologia bacteriana, investigando a fermentação e os processos químicos microbianos (SCHAECHTER, 2015). Nas décadas de 1930 e 1940, Alfred Hershey investigou culturas em fase logarítmica, enquanto Jacques Monod correlacionou a taxa de crescimento bacteriano com a concentração de substrato (SCHAECHTER, 2015). Seu trabalho destacou o conceito de estado estacionário, o que evidenciou a complexidade do crescimento e da divisão celular.

O estudo da adesão bacteriana teve início no século XX, com a microbiologia já consolidada (SCHAECHTER, 2015). Em 1933, Arthur Henrici desafiou a visão predominante, mostrando que as bactérias aderem a superfícies sólidas, ao contrário da ideia de que eram majoritariamente planctônicas (DWORKIN, 2012). Em 1965, Paul S. Meadows investigou a adesão bacteriana a superfícies abióticas, observando a fixação de organismos aquáticos em vidro (MEADOWS, 1965). Nas décadas de 1970 e 1980, William Costerton demonstrou que os biofilmes formam comunidades bacterianas complexas e resistentes a antibióticos, o que ampliou o interesse por superfícies bióticas (COSTERTON et al., 1987), (COSTERTON; STEWART; GREENBERG, 1999).

O avanço no entendimento da adesão bacteriana impulsionou estratégias para prevenir a formação de biofilmes (HORI; MATSUMOTO, 2010). Pesquisas sobre adesão em superfícies bióticas (MEADOWS, 1965) e biofilmes (COSTERTON et al., 1987), (COSTERTON; STEWART; GREENBERG, 1999) têm sido fundamentais para o desenvolvimento de métodos de controle. A

prevenção da adesão inicial é vista como crucial, uma vez que os biofilmes causam impactos negativos em diversos contextos (SPENGLER et al., 2021).

Superfícies funcionalizadas com agentes antimicrobianos eliminam bactérias antes da fixação, mas apresentam limitações, como curta durabilidade e liberação descontrolada (WANG et al., 2016), (ELBOURNE; CRAWFORD; IVANOVA, 2017), (VARGAS-ALFREDO et al., 2018), (LAZZINI et al., 2021). A liberação controlada de íons antimicrobianos é eficaz em ambientes com alta carga microbiana, mas pode causar efeitos colaterais a longo prazo (FERRARIS et al., 2017), (XIE et al., 2018), (HIKKU et al., 2018), (LUO et al., 2020), (KHAN et al., 2020), (LAZZINI et al., 2021).

Diversas modificações têm sido investigadas, como o uso de polímeros inteligentes (CAO et al., 2012), superfícies autolimpantes (ELBOURNE; CRAWFORD; IVANOVA, 2017) e o efeito lótus (LUTEY et al., 2018). Também foram exploradas soluções inspiradas em estruturas naturais, como pele de tubarão e asas de borboleta (WU et al., 2018b).

Superfícies micro e nanotexturizadas dificultam a adesão bacteriana, rompendo a parede celular e prevenindo a formação de biofilmes (TRUESDAIL et al., 1998), (LORENZETTI et al., 2015), (LIU et al., 2016), (LUAN et al., 2018), (NGUYEN et al., 2018). Sua eficácia foi comprovada em aço inoxidável (JANG et al., 2018) e possui grande relevância na prevenção de infecções (LINKLATER et al., 2021).

A rugosidade afeta a molhabilidade e a formação de biofilmes, com superfícies super-hidrofóbicas reduzindo a adesão bacteriana, enquanto rugosidades nanométricas dificultam o contato direto com a superfície (AL-AMSHAWEE et al., 2021), (YANG et al., 2022). No entanto, a eficácia dessas abordagens diminui ao longo do tempo, limitando sua aplicação (WU et al., 2018b). Superfícies multifuncionais têm sido propostas para melhorar a durabilidade dos materiais (MOGHADAM; PARSIMEHR; EHSANI, 2021), (ZHENG et al., 2021).

As propriedades físico-químicas das superfícies influenciam a adesão bacteriana, mas seu comportamento ainda é imprevisível (LAZZINI et al., 2021), (YANG et al., 2022). Mu et al. (2023b) observaram que superfícies hidrofóbicas com rugosidades entre  $2nm$  e  $390nm$  apresentaram até 75 vezes mais adesão, sendo a maior área de contato e menor energia de ativação favoráveis à adesão. Em contrapartida, superfícies super-hidrofóbicas inibem essa adesão devido a fatores como a pressão de Laplace e a redução das forças de van der Waals.

### 5.2.1 Histórico da Relação entre Adesão Bacteriana e Rugosidade

A rugosidade superficial exerce uma influência significativa sobre a adesão bacteriana, embora os efeitos observados variem entre os estudos. Enquanto diversas pesquisas confirmam uma correlação positiva entre a rugosidade e a adesão bacteriana (LIU et al., 2016), (NGUYEN et al., 2018), (LUTEY et al., 2018), (CUELLO et al., 2020), outros trabalhos não conseguem estabelecer uma relação consistente entre essas variáveis (FLINT; BROOKS; BREMER, 2000), (VERRAN; BOYD, 2001), (HILBERT et al., 2003). Essa discrepância sugere que fatores como a espécie bacteriana, o ambiente e as propriedades específicas da superfície podem desempenhar um papel fundamental na modulação dessa relação.

As teorias clássicas - termodinâmica, DLVO e XDLVO - tradicionalmente desconsideram a rugosidade superficial. No entanto, Wu et al. (2018b) destacam que a rugosidade pode modificar essas interações, funcionando como uma alternativa sustentável às modificações químicas. A rugosidade afeta diretamente a adesão bacteriana, sendo seu impacto influenciado por fatores como a espécie bacteriana, as condições do meio e as propriedades físico-químicas da superfície. Estudos mais recentes indicam que a rugosidade não apenas interfere na adesão inicial, mas também influencia a formação de biofilmes, configurando-se como um aspecto crucial para a compreensão dos mecanismos de fixação bacteriana (AL-AMSHAWEE et al., 2021), embora sua influência ainda seja motivo de debate (YANG et al., 2022).

Em termos gerais, superfícies rugosas tendem a favorecer a adesão bacteriana (TRUONG et al., 2012), (LORENZETTI et al., 2015), enquanto superfícies lisas, por sua vez, dificultam essa adesão (TRUONG et al., 2015). Contudo, a eficácia de nanoestruturas na prevenção da adesão ainda é um tema controverso. Embora alguns estudos, como o de Crawford et al. (2012), indiquem incertezas quanto aos benefícios de superfícies estruturadas, outros estudos mais recentes, como o de Lazzini et al. (2021), sugerem que micro e nanoestruturas podem inibir a formação de biofilmes, dependendo do tamanho das saliências. Em superfícies com saliências menores que as bactérias, a adesão pode ser reduzida, enquanto saliências maiores tendem a aumentar a área de contato e, conseqüentemente, favorecer a adesão. Além disso, Mu et al. (2023b) demonstraram que a rugosidade pode aumentar a adesão bacteriana ao ampliar a área de contato e diminuir a energia necessária para a fixação.

Superfícies super-hidrofóbicas e com rugosidade nanométrica têm se mostrado eficazes na redução da adesão bacteriana (AL-AMSHAWEE et al., 2021), (YANG et al., 2022). No entanto, em superfícies com poucos pontos de ancoragem, a adesão pode ser limitada (YANG et al.,

2022). Adicionalmente, revestimentos orgânicos, como a saliva, podem alterar essa interação, reduzindo a adesão observada em superfícies rugosas. A relação entre rugosidade e adesão permanece controversa, com variações significativas no número de bactérias aderidas, dependendo da rugosidade superficial (MU et al., 2023a). Superfícies hidrofóbicas tendem a favorecer a adesão, enquanto em superfícies super-hidrofóbicas esse efeito pode ser atenuado, indicando uma relação não linear. Além disso, outras propriedades, como a hidrofobicidade e as forças de van der Waals, também têm um impacto substancial sobre a adesão bacteriana.

Na escala submicrométrica, superfícies com rugosidade em torno dessa medida tendem a aumentar a adesão bacteriana, até um ponto crítico, após o qual não se observam mais ganhos significativos (MEI et al., 2011), (WANG et al., 2015), (ALAM et al., 2020). De acordo com Encinas et al. (2020), em algumas situações, a rugosidade pode até inibir a adesão. Segundo esses autores, superfícies ásperas favorecem maior deformação das células bacterianas e aumentam a área de contato, elevando a força adesiva. No entanto, quando a rugosidade é excessiva, a fixação inicial pode ser dificultada, com o ancoramento das bactérias ocorrendo apenas nas saliências mais proeminentes (SEDDIKI et al., 2014), (WANG et al., 2015). Além disso, rugosidades profundas, com vales pronunciados, podem aprisionar bactérias e protegê-las contra forças de cisalhamento, dificultando sua remoção (ORTEGA et al., 2010). Nesse contexto, o preenchimento dessas cavidades com óleo tem se mostrado uma alternativa eficaz na inibição da adesão e do crescimento bacteriano (AWAD; ASKER; HATTON, 2018).

Em escalas submicrométricas e micrométricas, vários estudos observaram uma correlação positiva entre rugosidade e adesão bacteriana (ALMAGUER-FLORES; XIMÉNEZ-FYVIE; RODIL, 2010), (SEDDIKI et al., 2014), (BOHINC et al., 2016), (WASSMANN et al., 2017), (ANNUNZIATA et al., 2017), (KUMAR et al., 2019), (LU et al., 2020). No entanto, Cuello et al. (2020) observaram que superfícies micrométricas podem, sob determinadas condições, reduzir a adesão da bactéria *Pseudomonas aeruginosa*.

### 5.3 TEORIAS E AVANÇOS NA COMPREENSÃO DO PROCESSO DE ADESÃO BACTERIANA

A teoria termodinâmica, juntamente com as teorias DLVO e XDLVO, tem sido amplamente utilizada para descrever as interações físico-químicas envolvidas nas fases iniciais da adesão bacteriana (TANDOGAN et al., 2017). Proposta por Johannes Lyklema nas décadas de 1960 e 1970, a teoria termodinâmica passou a relacionar a adesão às forças intermoleculares

entre a célula e a superfície (LYKLEMA, 2005). Posteriormente, Busscher e Mei (1997) expandiram esse modelo ao considerar as propriedades físico-químicas das superfícies como fatores determinantes na adesão e na formação de biofilmes.

A teoria DLVO, inicialmente formulada para descrever as interações entre partículas coloidais e superfícies (MARSHALL; STOUT; MITCHELL, 1971), foi adaptada para aplicação no contexto da adesão bacteriana, dada a semelhança de escala entre bactérias ( $0,5-2\mu m$ ) e coloides. Marshall foi um dos primeiros pesquisadores a aplicá-la nesse contexto (MARSHALL; STOUT; MITCHELL, 1971). A teoria XDLVO, uma extensão da DLVO, incorporou interações ácido-base de Lewis (OSS, 1993), oferecendo uma descrição mais abrangente. No entanto, ambas as teorias apresentam limitações diante da complexidade inerente ao processo de adesão bacteriana (HORI; MATSUMOTO, 2010).

O método DA, desenvolvido por Derjaguin em 1934 (DERJAGUIN, 1934), foi aplicado à teoria DLVO na década de 1940 (DERJAGUIN, 1941) e, posteriormente, à teoria XDLVO na década de 1990 (ISRAELACHVILI, 2011). Já o método SEI, introduzido por Bhattacharjee e Elimelech (1997) no final dos anos 1990, contribuiu com uma nova abordagem para a avaliação das interações entre superfícies e microrganismos.

#### 5.4 EVOLUÇÃO DA DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL: UMA REVISÃO

Segundo Kowaltowski (1996), John von Neumann integrou computação, teoria e experimentos na década de 1940. Na mesma época, Ginger (1944) criou um código FORTRAN para simular partículas no ar. Com o avanço dos computadores nos anos 1960, a simulação numérica impulsionou o desenvolvimento da CFD (DATE, 2005). De acordo com Gao et al. (2022), a computação científica tornou-se essencial por possibilitar a resolução de EDP's não lineares, complementando teoria e experimentos. A CFD passou a ter papel central na solução de equações de transporte, especialmente em contextos onde a modelagem experimental era limitada ou inviável.

Os métodos de CFD passaram a ser amplamente utilizados na resolução de problemas em Mecânica dos Fluidos com base nas equações de Navier-Stokes, que incluíram termos viscosos newtonianos às equações de movimento (CENGEL; CIMBALA, 2015). Como essas equações não possuem solução analítica geral, sua resolução exige métodos numéricos. Segundo Zawawi et al. (2018), a CFD superou as limitações dos métodos clássicos e mostrou-se eficaz na simulação de fluxos compressíveis, incompressíveis, laminares, turbulentos e com reações químicas.

Suas aplicações abrangem áreas como processamento químico (HARRIS et al., 1996), alimentos (SCOTT; RICHARDSON, 1997), meio ambiente (KIM; BOYSAN, 1999), energia e combustão (STOPFORD, 2002), aerodinâmica (SHANG, 2004), tratamento de água (ZAWAWI et al., 2017) e os setores de petróleo e gás (SU et al., 2019).

A CFD passou a ter destaque na área biológica, especialmente no estudo da transmissão de patógenos. Segundo Peng, Chen e Liu (2020), a técnica contribuiu para a Mecânica dos Fluidos aplicada ao ambiente ao oferecer subsídios para a formulação de medidas de redução dos riscos de infecção. Durante a pandemia da COVID-19, foi amplamente empregada na análise da dispersão do SARS-CoV-2. Mohamadi e Fazeli (2022) ressaltaram sua aplicação na avaliação de estratégias de distanciamento social, eficácia de máscaras, dinâmica de espirros e tosses, além do estudo de sistemas de ventilação e ar-condicionado.

No contexto da adesão bacteriana, a CFD tem sido utilizada em diversos estudos, embora métodos tradicionais, como FDM, FEM e FVM, ainda predominem. De acordo com Zhang, Ademiloye e Liew (2019), essas abordagens apresentam limitações na modelagem de sistemas biológicos. Em alguns trabalhos, as bactérias são representadas como corpos rígidos com geometrias simplificadas. De fato, Mercier-Bonin et al. (2011), com base em Lorthois, Schmitz e Anglés-Cano (2001), analisaram a adesão de esporos de *Bacillus cereus* e *Bacillus pumilus* em regime de fluxo laminar. Utilizando o FEM, observaram que a fixação ao aço inoxidável AISI 316L variava conforme a presença e a quantidade de apêndices celulares.

O modelo de corpo rígido foi adotado por Boulbene, Morchain e Schmitz (2010) sem o uso do FEM, sendo posteriormente aplicado por Boulbene et al. (2012) para quantificar a força de adesão de esporos esféricos e bastonetes de *Bacillus cereus* em aço inoxidável. As simulações, realizadas em fluxo de cisalhamento laminar e comparadas a dados obtidos por Microscopia de Força Atômica (AFM), mostraram que os bastonetes tendem a se alinhar ao fluxo, enquanto os esporos esféricos favorecem a reorientação e o rolamento. No entanto, o modelo proposto por Lorthois, Schmitz e Anglés-Cano (2001) apresentou limitações quando aplicado a superfícies texturizadas, uma vez que a rigidez bacteriana não garante proteção total contra os efeitos da superfície (LAZZINI et al., 2021).

Chinnaraj et al. (2021) investigaram a adesão inicial de *Streptococcus gordonii* em aço inoxidável e observaram que superfícies mais rugosas favoreciam a adesão em condições de fluxo estático. Sob fluxo dinâmico, ao utilizar o FDM em conjunto com a teoria XDLVO, observaram uma leve redução na adesão, o que foi consistente com os dados experimentais.

Wong e Gordon (2021) utilizaram o FEM para estimar as deformações em cepas de *Pseu-*

*domonas aeruginosa*, *Bacillus subtilis* e *Staphylococcus aureus* durante o processo de adesão. De acordo com Elbourne, Crawford e Ivanova (2017), mesmo células Gram-positivas, embora mais rígidas, podem sofrer danos e lise ao interagirem com nanoestruturas biomiméticas.

Lazzini et al. (2021) propuseram um modelo baseado em MD para estudar a adesão inicial de *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*. Os resultados das simulações mostraram que superfícies onduladas e com nanopilares desfavoreciam a adesão nas fases iniciais.

#### 5.4.1 Avanços em Métodos sem Malha

Segundo Ferziger e Perić (2002), os métodos com malha evoluíram em termos de precisão, eficiência e capacidade de simular problemas complexos. No entanto, esses métodos apresentaram limitações em relação à representação de geometrias complexas e à adaptação da malha (ZHANG; ADEMILOYE; LIEW, 2019). Por outro lado, os métodos sem malha superaram essas barreiras, oferecendo maior flexibilidade e melhor desempenho em cenários dinâmicos e com formas irregulares (LIU; LIU, 2003).

Liszka e Orkisz (1980) propuseram o método das Diferenças Finitas Generalizado (GFD), uma adaptação sem malha do FDM, que simplificou a discretização de contornos e possibilitou a condensação local. Posteriormente, Nayroles, Touzot e Villon (1992) desenvolveram o DEM, com base no método dos Mínimos Quadrados Móveis (MLSM) de Lancaster e Salkauskas (1981), para resolver problemas a partir dos contornos e deslocamentos dos nós, eliminando a necessidade de malha. Esse método suavizou e interpolou dados dispersos, superando as limitações do FEM. Uma das primeiras aplicações registradas foi a simulação do movimento de esferas em moinhos rotativos (MISHRA; RAJAMANI, 1992).

Belytschko, Lu e Gu (1994) apresentaram o EFGM, amplamente adotado na mecânica do contínuo. Segundo os autores, esse método ofereceu maior precisão que o DEM, ao utilizar uma distribuição de nós — uniforme ou dispersa — em vez de depender de malhas no domínio.

Sulsky, Zhou e Schreyer (1995) propuseram o método Partícula na Célula (PIC), uma extensão do método Partícula Implícita de Fluido (FLIP) desenvolvido por Brackbill e Ruppel (1986), aplicado à Mecânica dos Sólidos sob uma abordagem lagrangiana. O método FLIP empregou partículas em uma grade adaptativa para simular fluxos bidimensionais, reduzindo a dissipação numérica e capturando grandes variações. Em seguida, Sulsky e Schreyer (1996) desenvolveram o MPM, que combinou malhas lagrangianas e eulerianas, superando limitações dos métodos tradicionais.

Liu, Jun e Zhang (1995) introduziram o RKPM, um método sem malha que reuniu características do SPH, MLSM, DEM e EFGM. Esse método aprimorou o SPH por meio da inclusão de uma função de correção no kernel, aumentando sua precisão e consistência. Em seguida, Jun (1996) aplicaram o RKPM em simulações com grandes deformações em materiais elásticos não lineares e fluidos compressíveis. No mesmo ano, Chen et al. (1996) empregaram o método na modelagem de deformações em materiais de borracha, enquanto Chen et al. (1998) o aplicaram à conformação de metais.

Melenk e Babuška (1996) propuseram o método de Partição de Elementos Finitos Unitários (PUFEM), que utilizou a estrutura das EDP's para o desenvolvimento de métodos mais eficientes. No mesmo ano, Onate et al. (1996) apresentaram o método do Ponto Finito (FPM), um método sem malha voltado à resolução de problemas de convecção-difusão e escoamento de fluidos, baseado na interpolação por mínimos quadrados ponderados e na utilização de pontos para integração numérica.

Em 1998, Atluri e Zhu (1998) propuseram o MLPG, que eliminou o uso de malha tanto na interpolação quanto na integração de energia, enquanto Zhu, Zhang e Atluri (1998) apresentaram a equação Integral de Contorno Local (LBIE), com abordagem semelhante. Ainda em 1998, Sukumar, Moran e Belytschko (1998) e, posteriormente, Sukumar et al. (2001) introduziram o método do Elemento Natural (NEM) e o método do Vizinho Natural de Galerkin (NNGM) respectivamente, com base em estruturas como o Diagrama de Voronoi e a Triangulação de Delaunay. Em 2001, Chen et al. (2001) modificaram o MLPG por meio de uma integração nodal estabilizada, com o objetivo de aumentar a exatidão linear. No mesmo ano, Liu e Gu (2001) propuseram o PIM para análise de tensões bidimensionais, enquanto Liu (2002) apresentaram o método de Pontos (PAM), uma nova abordagem com a mesma finalidade.

Idelsohn et al. (2003) desenvolveram o método dos Elementos Finitos sem Malha (MFEM), que integrou as vantagens dos métodos sem malha com a conectividade nodal do FEM, utilizando funções de forma baseadas nas posições dos nós. Por sua vez, Sukumar (2004) propuseram interpolantes poligonais de entropia máxima, aplicados a problemas em mecânica computacional.

Liu et al. (2005) desenvolveram o método de Interpolação de Ponto Radial sem Malha (RPIM), uma variação do PIM voltada à análise de tensões em sólidos tridimensionais, utilizando funções de forma sem malha baseadas em função de Base Radial (RBF) e na formulação fraca de Galerkin. Conforme apontado por Zhang, Ademiloye e Liew (2019), a abordagem por

RBF permitiu a aproximação de variáveis de campo em todo o domínio, sem a necessidade de malhas ou células de fundo para integração.

Zhang et al. (2008) combinaram o EFGM com o método da Interpolação de Mínimos Quadrados Móveis (IMLS), originando o método de Galerkin sem Elementos (IEFG), que aprimorou a resolução de problemas de elasticidade bidimensional. Posteriormente, Zhang, Zhao e Liew (2009a) e Zhang, Zhao e Liew (2009b) aplicaram o IEFG a casos bidimensionais e tridimensionais, utilizando funções de base ortogonal ponderada e interpolantes baseados em MLSM.

Dinis, Jorge e Belinha (2009) propuseram o método da Interpolação de Ponto Radial Vizinho Natural (NNRPIM), que combinou o NEM com o RPIM. Em seguida, Cui, Liu e Li (2011) apresentaram o método da Interpolação de Ponto Radial de Hermite Suavizada (SHRPIM), uma versão suavizada do PIM, que obteve maior precisão em problemas de flexão e exigiu menor continuidade. Posteriormente, Belinha, Dinis e Jorge (2013) introduziram o método dos Elementos Radiais Naturais (NREM), que utilizou vizinhos naturais para reforçar a conectividade entre os nós.

#### **5.4.2 Uma Visão Geral sobre Métodos de Partículas**

Métodos de partículas têm sido amplamente empregados na modelagem de sistemas físicos. Dentre eles, o método SPH consolidou-se como a principal técnica sem malha para a simulação de fluidos (LIU; LIU, 2003). Antes do desenvolvimento do SPH, o método de Elemento Discreto (DSEM), proposto por Cundall (1971), foi amplamente utilizado na simulação de materiais granulares e rochas (MUNJIZA, 2004).

O método DPD, introduzido por Hoogerbrugge e Koelman (1992), combina elementos da MD e dos Autômatos de Gás de Rede (LGA), apresentando desempenho computacional superior ao da MD e maior flexibilidade que métodos baseados em LGA, o que o torna particularmente adequado para a simulação de fluidos em escala mesoscópica.

O método MPS, desenvolvido por Koshizuka e Oka (1996), realiza o cálculo da densidade de forma implícita, enquanto a pressão e a viscosidade são tratadas explicitamente. O deslocamento das partículas é determinado com base na interação com partículas vizinhas, por meio de funções kernel, permitindo lidar com grandes deformações e interfaces complexas.

Observa-se que esses métodos sem malha evoluíram com o objetivo de alcançar maior precisão e eficiência, bem como de viabilizar sua aplicação em problemas complexos — um

movimento semelhante ao observado no desenvolvimento dos métodos com malha (FERZIGER; PERIĆ, 2002).

### 5.4.3 Evolução do Método SPH

O método SPH, desenvolvido por Gingold e Monaghan (1977) e Lucy (1977) para simulações astrofísicas, consolidou-se como uma ferramenta precisa em CFD, especialmente em situações nas quais a realização de experimentos físicos se mostra inviável (GOMEZ-GESTEIRA et al., 2010). Posteriormente, Gingold e Monaghan (1982) analisaram diferentes funções de kernel e demonstraram que estimativas mais simples contribuem para a melhoria da conservação das propriedades físicas. No mesmo ano, Monaghan (1982) tratou o SPH como uma interpolação por kernel, aproximando-o conceitualmente do FDM. Já Monaghan e Gingold (1983) introduziram o conceito de viscosidade artificial com o objetivo de aumentar a estabilidade em simulações envolvendo choques.

A partir da década de 1990, os avanços teóricos e computacionais permitiram a ampliação das aplicações do SPH. Monaghan (1992) realizou uma revisão abrangente do método, abordando desde aplicações em astrofísica até aspectos como a modelagem da viscosidade e da condução térmica. Na sequência, Monaghan (1994) aplicou o SPH à simulação de escoamentos incompressíveis com superfícies livres, o que resultou na formulação WCSPH, voltada à modelagem de fluidos fracamente compressíveis e amplamente utilizada na Dinâmica dos Fluidos (VIOLEAU; ROGERS, 2016). Essa formulação apresenta maior eficiência computacional em comparação ao método SPH Incompressível (ISPH), o qual requer a resolução de uma equação de Poisson para o cálculo da pressão (MORRIS; FOX; ZHU, 1997).

Desde então, diversos avanços foram incorporados ao WCSPH. Zhang, Hu e Adams (2017) desenvolveram um solver de Riemann com baixa dissipação, posteriormente aprimorado por Zhang, Ademiloye e Liew (2019), por meio de uma reconstrução baseada no Esquema Não-Oscilatório Essencialmente Ponderado (WENO). Buscando maior precisão, Garoosi e Shakibaeinia (2020) introduziram a função de Densidade Sem Derivadas do Kernel (KDF), enquanto Negi, Ramachandran e Haftu (2020) propuseram uma abordagem híbrida para tratamento de contornos em túneis de vento, a qual reduziu o número de partículas e melhorou a qualidade dos resultados. No contexto de simulações multifásicas, Rezavand, Zhang e Hu (2020) apresentaram uma formulação específica e Adepu e Ramachandran (2024) estenderam a Formulação da Velocidade de Transporte (TVF) e as Técnicas de Deslocamento de Partículas

(PST) com correções adicionais. Mais recentemente, Kincl e Pavelka (2023) propuseram um código reversível no tempo, possibilitando a análise da irreversibilidade em conformidade com a segunda lei da termodinâmica.

Além disso, Monaghan expandiu significativamente o uso do SPH, aplicando-o a uma variedade de fenômenos, como fluxos multifásicos (MONAGHAN; KOCHARYAN, 1995), correntes de gravidade e ondas solitárias (MONAGHAN, 1996), fluxos bifásicos com abordagem implícita (MONAGHAN, 1997), correntes gravitacionais (MONAGHAN et al., 1999), ondas de praia (MONAGHAN; KOS, 1999) e à modelagem do gerador de ondas de Scott Russell (MONAGHAN; KOS, 2000).

Além de J. J. Monaghan, diversos pesquisadores impulsionaram o desenvolvimento do SPH, ampliando suas aplicações desde a astrofísica até a engenharia e enfrentando desafios como fluxos multifásicos e a formulação de modelos mais robustos. O método evoluiu tanto em seus fundamentos teóricos quanto em suas aplicações práticas. Revisões realizadas por Liu e Liu (2010), Gomez-Gesteira et al. (2010), Wang et al. (2016) e Zhang et al. (2019) destacaram essas inovações, enquanto estudos mais abrangentes foram conduzidos por Liu e Liu (2003) e Violeau (2012).

Na área da astrofísica, o SPH foi empregado em investigações sobre colisões e fragmentação de nuvens (DURISEN et al., 1986), colisões estelares (BENZ, 1990a), (BENZ, 1990b), (MONAGHAN, 1992), (RASIO; JR, 1999), (FABER; RASIO, 2000), (FABER; RASIO; MANOR, 2000), impactos e formação da Lua (BENZ, 1990a), evolução do universo (MONAGHAN, 1990), cosmologia (EVRARD, 1988), (SHAPIRO et al., 1996), explosões de supernovas (NAGASAWA; NAKAMURA; MIYAMA, 1988), (HERANT; BENZ, 1991) e formação de galáxias (MONAGHAN; LATTANZIO, 1991), (BERCZIK; KOLESNIK, 1993), (BERCZIK; KOLESNIK, 1998), (BERCZIK, 2000).

O SPH tem sido aplicado também em estudos envolvendo plasmas magnéticos, incluindo simulações de ondas Alfvênicas (PHILLIPS; MONAGHAN, 1985), colapsos de nuvens de gás (HABE, 1989) e ondas expansivas (STELLINGWERF; JR, 1994). Price (2012) destacou os avanços obtidos nas simulações baseadas em Magnetohidrodinâmica (MHD).

Na área da Mecânica dos Sólidos, o SPH foi utilizado em investigações sobre impactos (LIBERSKY; PETSCHER, 1991), (JOHNSON; STRYK; BEISSEL, 1996), dinâmicas elástico-plásticas (LIBERSKY et al., 1993), fraturas (BENZ; ASPHAUG, 1993), (RANDLES; LIBERSKY, 1996), sólidos frágeis (BENZ; ASPHAUG, 1995), impactos entre sólidos (BENZ; ASPHAUG, 1994) e processos de conformação de metais (BONET; KULASEGARAM, 2000).

Na Dinâmica dos Fluidos, o SPH tem sido amplamente empregado, extrapolando sua

aplicação para além dos escoamentos com superfície livre e multifásicos (MONAGHAN, 1994), (MONAGHAN; KOCHARYAN, 1995). O método tem sido adotado em simulações de explosões submarinas (SWEGLER; ATTAWAY, 1995), correntes de gravidade (MONAGHAN, 1996) e condução de calor (CHEN; BERAUN; CARNEY, 1999). Visando aumentar a eficiência e a precisão em escoamentos com superfície livre, Ferrari et al. (2009) aprimoraram a formulação proposta por Monaghan (1994).

As extensões do SPH para escoamentos incompressíveis incluem o uso de equações de estado quase incompressíveis (MORRIS; FOX; ZHU, 1997), penalizações para grandes deformações (BONET; BURTON, 1998) e soluções mais precisas, embora mais custosas, da equação de Poisson (LO; SHAO, 2002). O método ISPH, proposto por Shao e Lo (2003) com base na formulação de Cummins e Rudman (1999), foi aplicado a escoamentos com superfície livre. Filtros de densidade foram empregados por Colagrossi e Landrini (2003) em simulações de escoamentos interfaciais bidimensionais, enquanto Issa et al. (2005) e Shao et al. (2006) validaram simulações de fluxos incompressíveis e propagação de ondas. Em comparações entre versões semi-implícitas, ISPH e WCSPH indicaram a superioridade do ISPH em diversos cenários (LEE et al., 2008). Estudos mais recentes, como o de Tafuni, Giorgi e Rosis (2021), analisaram fluxos viscosos fracamente compressíveis, e Meier et al. (2021) propuseram uma formulação WCSPH para modelar mudanças de fase termocapilares.

O SPH continua sendo amplamente utilizado em problemas envolvendo FSI, escoamentos, simulações de turbulência e cenários envolvendo grandes deformações. Violeau e Issa (2007) revisaram diferentes modelos de turbulência adaptados ao SPH, enquanto Antoci, Gallati e Sibilla (2007) propuseram um modelo de FSI sem viscosidade artificial. No contexto do acoplamento com corpos rígidos, Akinci et al. (2012) desenvolveram um método eficiente, utilizado nesta tese, que garante a conservação do momento linear e trata adequadamente descontinuidades, posteriormente estendido a sólidos elásticos por Akinci et al. (2013). Aplicações em engenharia oceânica e deformações intensas foram abordadas por Zhang et al. (2017) e por Zhang et al. (2019), enquanto Liu e Zhang (2019) evidenciaram a eficácia do método em simulações envolvendo interfaces móveis e deformações não lineares, destacando tanto aplicações puras quanto híbridas em FSI com estruturas rígidas, elásticas e flexíveis.

Em simulações de escoamento e transferência de calor em microcanais, Hosain, Bel-Fdhila e Kyprianidis (2019) validaram o SPH por meio de comparações com métodos tradicionais, como o método FVM e o método de Simulação Numérica Direta (DNS). Os resultados demonstraram boa precisão em escoamentos laminares, e os autores sugerem a ampliação do método para

fluxos turbulentos, visando aplicações mais abrangentes na engenharia térmica.

Na área da manufatura aditiva, Russell, Souto-Iglesias e Zohdi (2018) adaptaram o SPH para simulações de escoamentos isotérmicos incompressíveis, destacando-se na modelagem de fluidos com contorno livre. Nesse contexto, Kincl et al. (2023) propuseram o método SPH Compatível Termodinamicamente Hiperbólico Simétrico (SHTC-SPH), uma abordagem unificada para a modelagem de fluidos e sólidos, que demonstrou bons resultados experimentais em processos como a solidificação na impressão 3D. Além disso, o SPH tem sido amplamente utilizado na computação gráfica para a simulação realista de fluidos e sólidos (KOSCHIER et al., 2022).

Na área da saúde, o SPH tem ganhado destaque, especialmente em simulações cardíacas. Lluch et al. (2019) propuseram o método como uma alternativa ao FEM, enquanto Zhang et al. (2021) desenvolveram um modelo integrado de eletrofisiologia e acoplamento eletromecânico, demonstrando a precisão do SPH em modelagens cardíacas. O potencial do método também foi destacado por Toma et al. (2021) em aplicações biomédicas, como diagnósticos e tratamentos.

O SPH tem se mostrado eficaz na modelagem de fenômenos biológicos complexos, como a formação e evolução de biofilmes, incluindo processos de erosão, transporte e difusão de nutrientes, deformação e resposta mecânica. Estudos como os de Soleimani et al. (2016), Dupuy e Silk (2016) e Soleimani (2017) demonstraram sua aplicação na simulação da colonização bacteriana, do crescimento, da adesão e das interações com o fluxo. Trabalhos mais recentes, como os de Feng et al. (2021), Feng, Neuweiler e Liu (2021) e Carrera et al. (2022), expandiram essa abordagem ao investigar a mecânica dos biofilmes, o transporte reativo e o ciclo de vida em ambientes fluidodinâmicos. Além disso, Feng e Neuweiler (2024) propuseram um modelo poroelástico para simular FSI, considerando variações de porosidade sob diferentes condições de carga. Apesar desses avanços, a aplicação do SPH à adesão bacteriana a superfícies rugosas permanece como um tema pouco explorado, constituindo o foco desta tese.

## 6 METODOLOGIA

### 6.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta o modelo computacional desenvolvido para simular a adesão inicial de uma célula bacteriana rígida a uma superfície rugosa. A abordagem emprega o método SPH com o potencial de LJ para representar as interações entre a bactéria, o fluido e a superfície. São descritas as etapas de implementação, as principais suposições adotadas e os parâmetros utilizados na simulação, com ênfase na modelagem da rugosidade da superfície e nas forças de interação que governam o comportamento do sistema.

### 6.2 DESCRIÇÃO DO MODELO NUMÉRICO

O modelo numérico foi desenvolvido para simular a adesão inicial de uma célula bacteriana a uma superfície rugosa, com ênfase nas interações entre a célula, o fluido e a superfície. O modelo combina o método SPH com o potencial de LJ para representar as interações entre esses três componentes. A célula bacteriana foi modelada como uma esfera rígida, inspirada na bactéria *Staphylococcus aureus* (BAILEY et al., 2014), e foi representada por partículas inseridas em um fluido simulado por meio do framework PySPH (RAMACHANDRAN et al., 2021). O exemplo *sphere in vessel* foi adaptado para incluir uma textura na base do tanque representando a superfície (AKINCI et al., 2012).

A textura da superfície foi gerada a partir de dados experimentais de aço inoxidável AISI 316L texturizado a laser, obtidos por meio de ShFM (LUTEY et al., 2018). Esses dados foram processados com o auxílio de um script em Python, responsável por selecionar amostras de forma aleatória. Para o modelo, adotaram-se propriedades mecânicas compatíveis com a bactéria *Staphylococcus aureus*, uma espécie Gram-positiva conhecida por apresentar uma parede celular espessa e rígida, composta por peptidoglicano (ELBOURNE et al., 2019). Essa escolha visou garantir maior alinhamento com as observações experimentais (ver Figura 18).

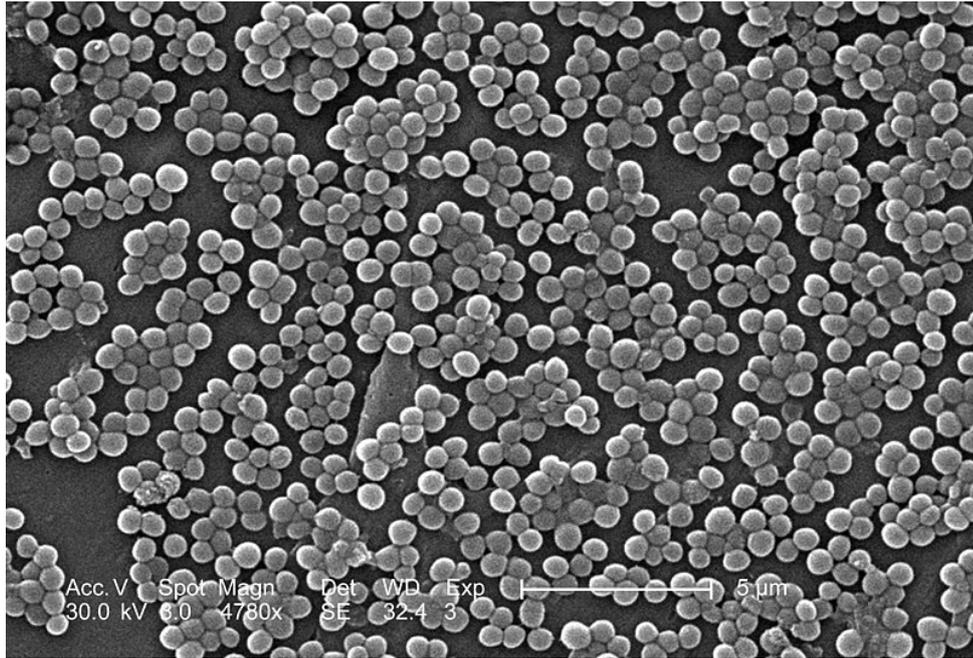


Figura 18 – Cepas de *Staphylococcus aureus*.

**Fonte:** (Wikimedia Commons, s.d.)

A interação entre a bactéria e a superfície foi modelada por meio do potencial de LJ (WANG et al., 2020), enquanto o acoplamento entre a célula e o fluido seguiu o modelo proposto por Akinci et al. (2012). A dinâmica do fluido baseou-se na formulação WCSPH (MONAGHAN, 2005), que incorporou as forças de pressão, viscosidade e as interações entre o fluido e a superfície. Para as células bacterianas, as equações de movimento de corpo rígido seguiram o modelo descrito por Coumans (2011).

A abordagem adotada, fundamentada no SPH, possibilitou a modelagem tanto da bactéria quanto da superfície como conjuntos de partículas. Essa estratégia representou uma vantagem significativa em relação às teorias tradicionais, como a DLVO, que consideram apenas uma distância média entre duas superfícies para estimar as forças de interação, sendo, portanto, limitada na representação de superfícies rugosas. Ao discretizar a superfície e a bactéria em partículas, o modelo permitiu o cálculo das forças de adesão entre partículas vizinhas, tornando o SPH especialmente eficaz na representação de superfícies com formas irregulares (ver Figura 19).

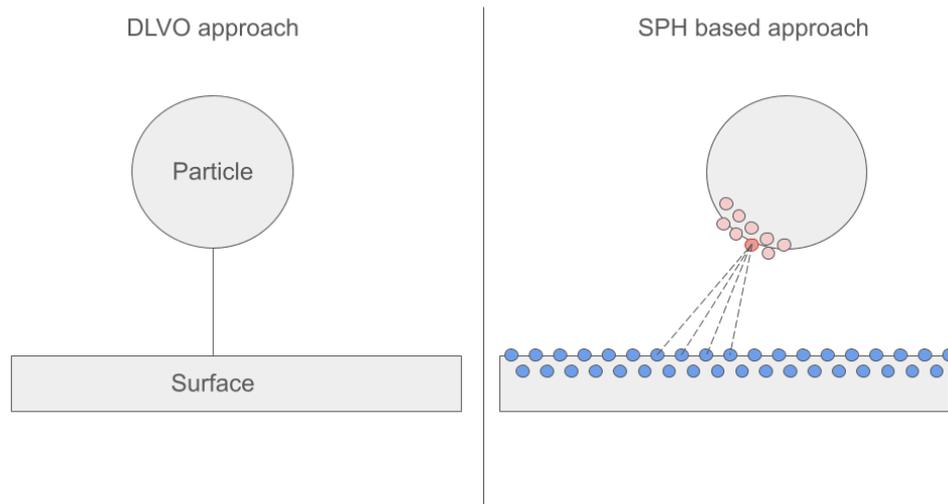


Figura 19 – Diagrama comparando as abordagens baseadas em DLVO e SPH.

Fonte: Da autora

### 6.2.1 Interação Bactéria e Superfície

A adesão da bactéria rígida à superfície rugosa foi modelada por meio de forças de adesão dependentes da proximidade entre a célula bacteriana e a rugosidade da superfície, descritas através do potencial de LJ (WANG et al., 2020). Esse potencial é definido por:

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (6.1)$$

em que  $\epsilon$  representa a profundidade do poço de energia,  $\sigma$  corresponde à distância característica que define a transição entre as interações atrativas e repulsivas, e  $r$  denota a distância entre duas partículas. O termo  $\left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12}$  descreve a repulsão estérica, enquanto  $\left( \frac{\sigma}{r} \right)^6$  representa a atração por dispersão de London (ISRAELACHVILI, 2010).

A curva do potencial de LJ em função da distância  $r$  é ilustrada na Figura 20 a seguir.

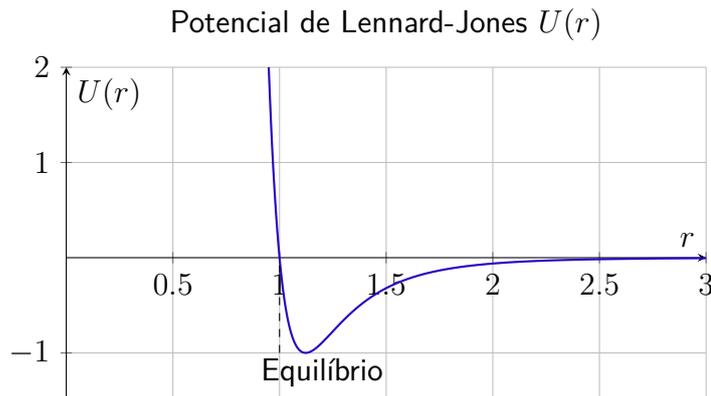


Figura 20 – Curva do potencial de Lennard-Jones  $U(r)$  em função da distância  $r$ .

**Fonte:** Da autora

A bactéria rígida foi representada como um corpo composto por partículas fixas, cujas posições relativas permaneceram constantes ao longo do tempo. A superfície rugosa foi modelada a partir de partículas distribuídas de modo a refletir a rugosidade da superfície, incluindo suas asperidades. Tanto à bactéria quanto à superfície foram atribuídas propriedades como massa, posição e os parâmetros de interação  $\epsilon$  e  $\sigma$ , cujos valores foram definidos com base em dados da literatura e ajustados para garantir maior alinhamento com as observações experimentais.

As forças de interação entre as partículas da bactéria e da superfície foram calculadas com base no potencial de LJ. Para cada par de partículas, a força de interação foi obtida a partir da derivada negativa do potencial em relação à distância  $r$ , de acordo com a seguinte expressão:

$$F = -\frac{dU(r)}{dr}. \quad (6.2)$$

Essa formulação possibilitou a avaliação das forças de adesão, considerando explicitamente a dependência do potencial em relação à separação entre as partículas. A derivada negativa de  $U(r)$  forneceu a força de interação, a qual está diretamente associada ao trabalho realizado durante a interação. Por esse motivo, o potencial  $U(r)$  é frequentemente denominado energia livre ou energia disponível. Tal expressão está intimamente relacionada ao conceito de trabalho de adesão entre partículas, sendo essencial para a descrição das forças envolvidas no processo de adesão bacteriana à superfície.

A curva da força do potencial de LJ derivada do potencial em função da distância  $r$  é apresentada na Figura 21 a seguir.

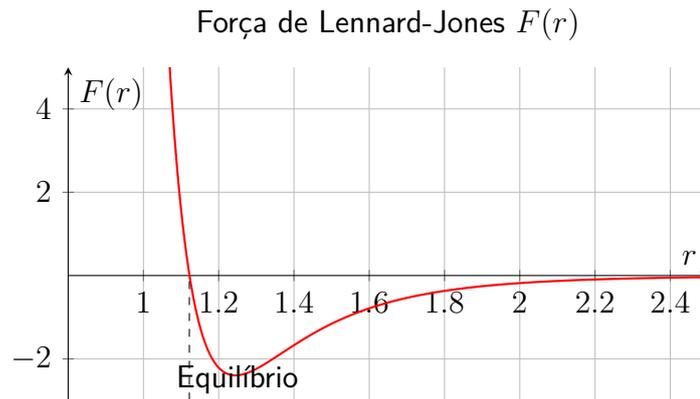


Figura 21 – Curva da força  $F(r)$  derivada do potencial de Lennard-Jones em função da distância  $r$ .

**Fonte:** Da autora

No contexto do modelo, a força  $F$  representou a interação de adesão entre cada partícula da bactéria e as partículas da superfície, conforme modelado por Hentschke (2019). As forças de interação foram calculadas iterativamente a cada passo de tempo, considerando as variações nas posições relativas das partículas. A força total de adesão exercida sobre a bactéria foi determinada pela soma das forças individuais  $F(r)$  para todos os pares de partículas em interação, expressa por:

$$F_t = \sum_i \sum_j F(r_{ij}), \quad (6.3)$$

em que  $r_{ij}$  representa a distância entre a  $i$ -ésima partícula da bactéria e a  $j$ -ésima partícula da superfície.

A rugosidade da superfície influenciou diretamente o padrão de adesão, uma vez que partículas localizadas em regiões de maior aspereza geraram forças de maior magnitude devido à redução da distância  $r$ . Dessa forma, as interações nas áreas mais elevadas da superfície - associadas à maior rugosidade - contribuíram significativamente para o valor da força total de adesão. As forças resultantes do potencial de LJ foram incorporadas ao modelo como forças externas atuando sobre a bactéria e a superfície, desempenhando um papel fundamental na simulação das interações dinâmicas. A consideração explícita dessas forças externas permitiu uma representação mais precisa dos fenômenos de adesão em superfícies rugosas, refletindo com maior fidelidade os efeitos topográficos da superfície nas interações bacterianas. Dessa maneira, a modelagem da interação entre bactéria e superfície por meio do potencial de LJ possibilitou a representação precisa dos fenômenos de adesão em superfícies rugosas, servindo de base para a análise dos resultados obtidos nas simulações subsequentes.

### 6.2.1.1 Pseudocódigo da Interação Bactéria e Superfície

---

**Algoritmo 1:** Simulação da interação entre a bactéria e a superfície com base no potencial de Lennard-Jones.

---

**Data:** Listas de partículas: partículas\_bacteria e partículas\_superficie;  
parâmetros do potencial de Lennard-Jones ( $\epsilon, \sigma$ ); raio de corte  $r_c$ .

**Result:** Força total de adesão  $\vec{F}_t$  atuando sobre a bactéria.

```

// Inicializar força total de adesão
1  $\vec{F}_t \leftarrow \vec{0}$ ;
// Para cada partícula da bactéria
2 foreach partícula_b  $\in$  partículas_bacteria do
    // Para cada partícula da superfície
3     foreach partícula_s  $\in$  partículas_superficie do
        // Calcular vetor de distância e módulo
4          $\vec{r} \leftarrow$  partícula_b.posição – partícula_s.posição;
5          $r \leftarrow ||\vec{r}||$ ;
        // Verificar se está dentro do raio de corte
6         if  $r < r_c$  then
            // O raio de corte  $r_c$  define a distância máxima até a qual as
            // partículas interagem. Interações além dessa distância são
            // desprezadas por serem fisicamente irrelevantes. O valor de
            //  $r_c$  é escolhido com base na diminuição do potencial de
            // Lennard-Jones para distâncias maiores.
            // Calcular magnitude da força de LJ
7              $F_{\text{mag}} \leftarrow 24\epsilon \left[ \frac{2\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{\sigma^6}{r^7} \right]$ ;
            // Calcular vetor unitário da direção da força
8              $\vec{u} \leftarrow \vec{r}/r$ ;
            // Calcular força vetorial e acumular
9              $\vec{F} \leftarrow -F_{\text{mag}} \cdot \vec{u}$ ;
10             $\vec{F}_t \leftarrow \vec{F}_t + \vec{F}$ ;

```

---

O algoritmo apresentado acima implementou numericamente as equações 6.1, 6.2 e 6.3,

realizando o cálculo iterativo das forças de adesão entre as partículas da bactéria e da superfície, fundamentado no potencial de LJ. Esse procedimento foi empregado a cada passo de tempo da simulação, assegurando a atualização contínua da força de adesão em função das posições instantâneas das partículas. A introdução do raio de corte  $r_c$  teve como objetivo otimizar o desempenho computacional, limitando as interações consideradas àquelas fisicamente relevantes, o que possibilitou a redução do custo computacional sem comprometer a precisão dos resultados obtidos.

### 6.2.2 Interação Superfície e Fluido

A interação entre a superfície rugosa e o fluido é fundamental para entender a adesão bacteriana e a precisão das simulações hidrodinâmicas. Para modelá-la, utilizou-se a formulação WCSPH, proposta por Monaghan (2005) e aprimorada por Akinci et al. (2012). Essa extensão do método SPH é amplamente adotada por sua capacidade de acomodar variações na densidade do fluido, sem a necessidade de resolver a equação de Poisson para a pressão, o que melhora a eficiência computacional.

A formulação WCSPH é eficaz na simulação das interações entre fluidos e superfícies rugosas, capturando com precisão forças hidrodinâmicas, como pressão e viscosidade (LIU; LIU, 2003). Ela lida com geometrias complexas e usa funções kernel para estimar as interações entre partículas, permitindo modelar os efeitos de irregularidades microscópicas na dinâmica do fluido e oferecendo uma descrição mais realista do comportamento do fluxo.

Essa abordagem permite simular o movimento do fluido ao redor da superfície rugosa, integrando forças viscosas e interações intermoleculares, como as de van der Waals, modeladas pelo potencial de LJ (ISRAELACHVILI, 2010). A incorporação do LJ foi eficaz na captura das interações de curto alcance, proporcionando uma representação mais precisa das condições reais, essencial para a análise da adesão bacteriana. Ela também oferece uma visão abrangente dos fatores que governam o comportamento do fluido e o processo de adesão em superfícies rugosas.

A formulação WCSPH se consolidou como uma ferramenta robusta e versátil para estudar a dinâmica de fluidos e suas interações com superfícies complexas, especialmente na adesão bacteriana. Ela permite entender os mecanismos dessas interações e explorar o impacto de parâmetros como rugosidade, propriedades do fluido e condições ambientais, sendo promissora para o desenvolvimento de estratégias de controle da adesão bacteriana em áreas como saúde,

indústria e meio ambiente.

Além das equações de continuidade (4.18) e de movimento (4.21) discutidas no Capítulo 4, esta seção apresenta as demais equações específicas da formulação WCSPH, utilizadas nesta tese para descrever de forma precisa a interação entre a superfície rugosa e o fluido. Essas equações complementam o modelo numérico, permitindo incorporar os efeitos da geometria da superfície e das forças atuantes no escoamento próximo à interface.

### 6.2.2.1 Função Kernel: Spline Cúbica

A função kernel spline cúbica é considerada fundamental no método SPH devido ao seu suporte compacto e à sua suavidade, características que garantem tanto a eficiência computacional quanto a precisão na representação das partículas em fluidos (LIU; LIU, 2003). Inicialmente proposta por Monaghan (2005), essa função tem sido amplamente adotada, inclusive em estudos posteriores, como o de Akinci et al. (2012), devido à sua capacidade de oferecer uma interpolação suave, melhorando a precisão dos cálculos e contribuindo para a estabilidade das simulações. Essas propriedades tornam a spline cúbica uma escolha recorrente em simulações baseadas no SPH.

A expressão da função kernel spline cúbica é definida por:

$$W(x, h) = \sigma_3 \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}q^2 + \frac{3}{4}q^3, & \text{para } 0 \leq q \leq 1, \\ \frac{1}{4}(2 - q)^3, & \text{para } 1 < q \leq 2, \\ 0, & \text{para } q > 2, \end{cases} \quad (6.4)$$

em que  $q = \frac{x}{h}$  representa a variável adimensional definida pela razão entre a distância  $x$  e o comprimento de suavização  $h$ , e  $\sigma_3$  corresponde a uma constante de normalização.

O fator de normalização dimensional em três dimensões é dado por  $\sigma_3 = \frac{1}{\pi h^3}$  (MONAGHAN, 1992). A rápida taxa de decaimento da função com a distância assegura que apenas as partículas vizinhas influenciem os cálculos das propriedades físicas, como densidade e pressão, contribuindo para a redução de oscilações indesejadas nesses campos (LIU; LIU, 2003). Esse comportamento possibilita uma interpolação eficiente, controlando a interação entre partículas distantes e evitando o impacto de partículas fora do alcance de suavização, o que melhora a estabilidade numérica das simulações.

A suavidade e a simplicidade funcional do kernel spline cúbico facilitam sua implementação,

promovendo o desenvolvimento eficiente de códigos de simulação e garantindo um equilíbrio adequado entre precisão e eficiência (MONAGHAN, 2005). Sua capacidade de fornecer uma interpolação suave e contínua, aliada ao suporte compacto, torna-o especialmente adequado para simulações de fluidos complexos, nas quais a precisão nas interações entre partículas vizinhas é crucial para a estabilidade e a fidelidade dos resultados.

A Figura 22 ilustra o comportamento da função kernel spline cúbica em função da variável adimensional  $q$ , evidenciando sua suavidade e o suporte compacto limitado ao intervalo  $0 \leq q \leq 2$ . Esse gráfico auxilia na visualização das propriedades da função, especialmente sua taxa de decaimento com a distância, que restringe a influência das partículas vizinhas ao raio de suavização.

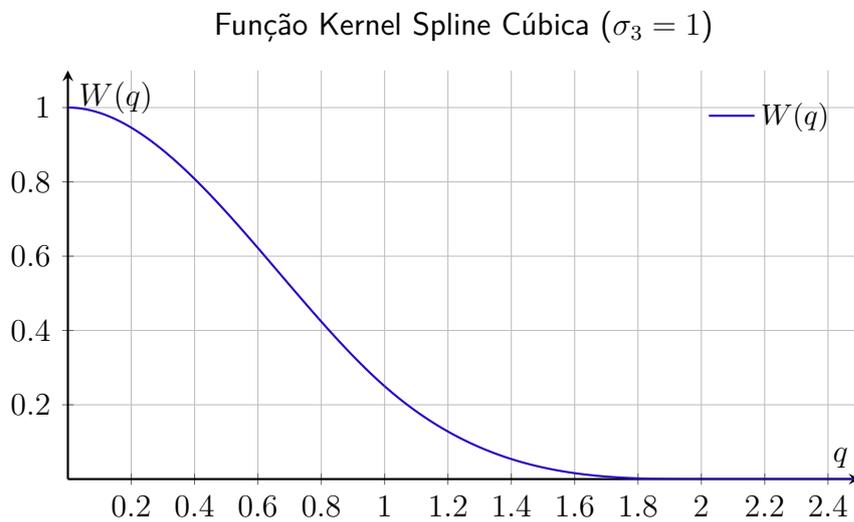


Figura 22 – Gráfico da função kernel spline cúbica com  $\sigma_3 = 1$ , em função da variável adimensional  $q = \frac{x}{h}$ .

**Fonte:** Da autora

Observa-se que o valor de  $W(q)$  decresce suavemente até se anular em  $q = 2$ , confirmando sua natureza de suporte compacto. Esse comportamento garante que apenas partículas dentro do raio de suavização contribuam para o cálculo das propriedades físicas, conforme discutido anteriormente.

#### 6.2.2.2 Cálculo da Densidade por Soma

O cálculo da densidade em simulações SPH é realizado por meio da soma das contribuições de massa das partículas vizinhas, ponderadas pela função kernel, conforme apresentado por Monaghan (2005):

$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}(h), \quad (6.5)$$

onde  $\rho_i$  representa a densidade da partícula  $i$ ,  $m_j$  é a massa da partícula  $j$ , e  $W_{ij}$  corresponde à função kernel, a qual depende da distância entre as partículas  $i$  e  $j$  e do comprimento de suavização  $h$ .

Esse procedimento se mostrou fundamental para assegurar a suavização dos resultados e a estabilidade numérica do método SPH, aspectos essenciais na modelagem de interações entre fluidos e sólidos, como no caso da adesão bacteriana a superfícies rugosas (LIU; LIU, 2003). A abordagem adotada refletiu o conceito de interpolação característico do SPH, no qual as propriedades físicas são distribuídas de forma contínua entre as partículas do sistema.

O uso da função kernel assegurou que apenas partículas localizadas dentro de um raio de suporte influenciassem o cálculo da densidade (LIU; LIU, 2003), promovendo maior eficiência computacional e reduzindo o impacto de partículas distantes. Essa característica foi particularmente importante para a simulação de fenômenos complexos, como variações de densidade em resposta a mudanças de pressão em sistemas levemente compressíveis, conforme tratado na formulação WCSPH (MORRIS; FOX; ZHU, 1997).

Adicionalmente, a densidade local calculada pela equação 6.5 mostrou-se essencial para a determinação de grandezas físicas, como pressão e forças (LIU; LIU, 2003), que dependem diretamente de parâmetros associados ao método SPH. Essa dependência permitiu a aplicação de forças de interação e a modelagem precisa de comportamentos físicos, garantindo resultados confiáveis em sistemas com elevada complexidade.

A função kernel desempenha uma papel crucial no cálculo da densidade em simulações SPH. Como mencionado, a densidade de uma partícula é obtida pela soma das contribuições de massa das partículas vizinhas, ponderadas pela função kernel  $W_{ij}(h)$ . Essa função depende da distância entre as partículas e do comprimento de suavização  $h$ , permitindo que apenas as partículas próximas influenciem os cálculos da densidade. A seguir, apresenta-se o gráfico da função kernel spline cúbica utilizada para calcular a densidade, ilustrando como a contribuição de cada partícula varia com a distância entre elas.

O gráfico da função kernel ilustra como a contribuição de cada partícula para o cálculo da densidade diminui com o aumento da distância  $x_{ij}$ . Como a função kernel é definida para decair rapidamente após um certo limite, as partículas que estão distantes, ou seja, fora do alcance de suavização, não influenciam o cálculo da densidade, o que assegura a eficiência

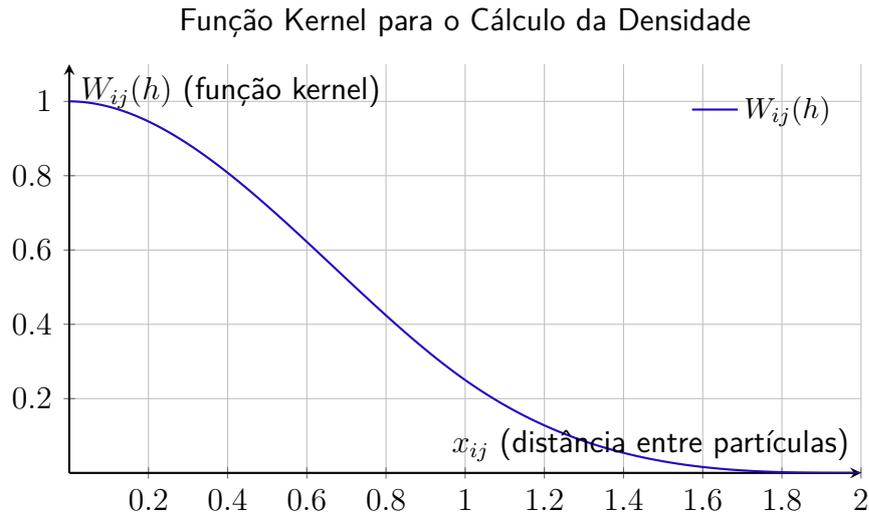


Figura 23 – Gráfico da função kernel  $W_{ij}(h)$  em função da distância  $x_{ij}$ , com  $\sigma_3 = 1$  e  $h = 1$ .

Fonte: Da autora

computacional e a estabilidade numérica do SPH. Esse comportamento é essencial para a modelagem de interações entre fluidos e sólidos, como observado em simulações de adesão bacteriana a superfícies rugosas, onde a precisão no cálculo da densidade impacta diretamente a fidelidade dos resultados.

### 6.2.2.3 Cálculo da Pressão pela Equação de Estado

A pressão nas simulações SPH foi calculada a partir da densidade, utilizando uma equação de estado. Essa abordagem possibilitou a modelagem da compressibilidade controlada do fluido, assegurando a estabilidade numérica e evitando oscilações indesejadas nos campos de densidade e pressão. Nesta tese, adotou-se a equação Tait-HG, proposta por Hughes e Graham (2010), a qual aprimorou a equação de estado de Tait, permitindo uma representação mais precisa da compressibilidade e do comportamento do fluido sob altas pressões e densidades.

A forma básica da equação de estado utilizada foi expressa por:

$$p_i = \frac{c^2 \rho_i}{\gamma} \left[ \left( \frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right], \quad (6.6)$$

em que  $\rho_0$  representa a densidade de referência do fluido,  $c$  corresponde à velocidade do som no fluido, e  $\gamma$  é o índice de compressão adiabática. Para as simulações envolvendo água, adotou-se, tipicamente, o valor  $\gamma = 7$  (RAMACHANDRAN et al., 2018).

Adicionalmente, aplicou-se um ajuste à densidade  $\rho_i$ , de modo a evitar valores negativos ou inconsistentes. Esse procedimento foi definido pela seguinte expressão:

$$\rho_i = \begin{cases} \rho_i, & \text{se } \rho_i \geq \rho_0 \\ \rho_0, & \text{se } \rho_i < \rho_0, \end{cases} \quad (6.7)$$

Esse ajuste assegurou que a densidade não fosse inferior ao valor de referência  $\rho_0$ , o que preservou a estabilidade dos cálculos, especialmente em situações caracterizadas por grandes variações de pressão ou compressibilidade (LIU; LIU, 2003). A combinação dessas equações garantiu um comportamento realista do fluido, mesmo sob condições extremas, sendo amplamente empregada em simulações que envolvem interações complexas entre fluidos e sólidos.

A figura a seguir apresenta a curva da pressão em função da densidade, obtida pela Tait-HG, com os parâmetros ajustados para simular a compressibilidade controlada do fluido. A curva ilustra como a pressão varia com a densidade do fluido evidenciando o comportamento compressível, especialmente sob pressões elevadas.

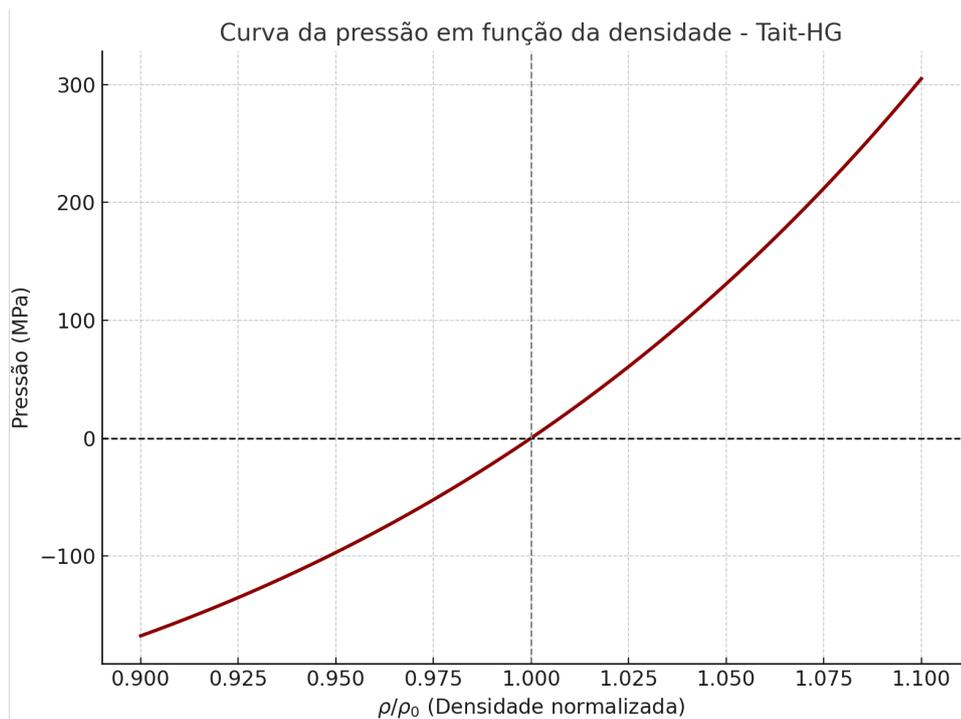


Figura 24 – Gráfico da curva da pressão em função da densidade usando a equação de Tait-HG ( $c = 1500\text{m/s}$ ,  $\gamma = 7$ ,  $\rho_0 = 1000\text{kg/m}^3$ ).

**Fonte:** Da autora

A curva da Figura 24 mostra a relação entre densidade e pressão calculada pela equação de Tait-HG, permitindo visualizar a compressibilidade controlada do fluido. Nota-se que, sob altas pressões, pequenas variações de densidade provocam grandes aumentos de pressão, caracterizando o comportamento quase incompressível do fluido. Essa representação gráfica

é fundamental para modelar interações entre fluido e sólido em simulações SPH, garantindo realismo mesmo em condições extremas.

#### 6.2.2.4 Correção de Velocidade: XSPH

A formulação WCSPH também incluiu termos adicionais para lidar com a compressibilidade e incorporou correções específicas, como o ajuste da velocidade das partículas. Entre essas, destacou-se a correção SPH Estendido (XSPH), descrita por Monaghan (2005), uma técnica amplamente empregada no SPH com o objetivo de melhorar a estabilidade e a suavidade das simulações de fluidos. Essa correção ajusta as velocidades das partículas com base na influência de suas vizinhas, reduzindo o ruído numérico e prevenindo comportamentos não físicos, como a interpenetração de partículas.

Essa abordagem demonstrou ser especialmente útil em simulações envolvendo interações complexas entre partículas, nas quais pequenas inconsistências nas velocidades poderiam comprometer a estabilidade ou gerar resultados irrealistas.

A correção XSPH foi implementada por meio da seguinte equação (MONAGHAN, 2005):

$$v'_i = v_i + \phi \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_i - v_j) W_{ij}, \quad (6.8)$$

em que  $v'_i$  representa a velocidade corrigida da partícula  $i$ ,  $v_i$  e  $v_j$  são as velocidades das partículas  $i$  e  $j$ , respectivamente,  $m_j$  é a massa da partícula  $j$ ,  $\rho_j$  é a densidade da partícula  $j$ , e  $W_{ij}$  é a função kernel que avalia a influência da partícula  $j$  sobre  $i$ . O parâmetro  $\phi$ , normalmente definido entre 0,01 e 0,1, controla o grau de suavização aplicado à correção.

Com a aplicação da correção XSPH, as velocidades das partículas vizinhas tornaram-se mais homogêneas, o que aumentou a estabilidade da simulação e reduziu descontinuidades abruptas ou comportamentos não físicos (MONAGHAN, 2005). Essa técnica foi especialmente importante em cenários com interação significativa entre partículas, como em modelagens de fluidos com altos gradientes de velocidade ou simulações multifásicas.

Para ilustrar o impacto da correção XSPH na suavização das velocidades, a Figura 25 apresenta um gráfico comparativo entre os campos de velocidade com e sem a aplicação da correção. A aplicação da XSPH resultou em maior uniformidade nas velocidades das partículas, reduzindo oscilações locais e promovendo um campo mais estável e fisicamente plausível.

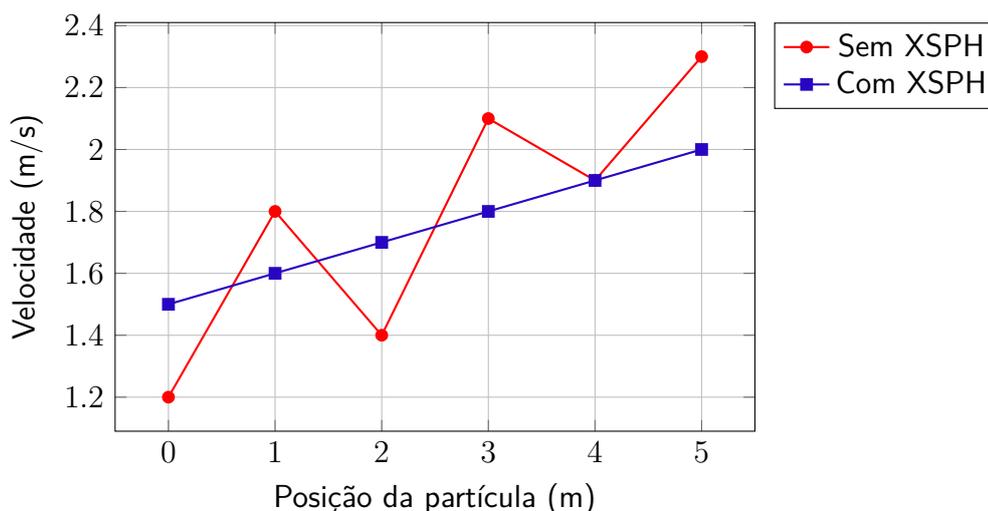


Figura 25 – Comparação das velocidades das partículas com e sem a aplicação da correção XSPH.

Fonte: Da autora

A inclusão da Figura 25 reforça, de maneira visual, a efetividade da correção XSPH na redução do ruído numérico e na promoção de um campo de velocidades mais suave, evidenciando a importância dessa técnica para garantir a qualidade e a estabilidade das simulações SPH.

#### 6.2.2.5 Esquema de Integração Temporal

A formulação WCSPH, assim como o tradicional SPH, resolveu problemas dinâmicos por meio da integração temporal, a qual consistiu em acompanhar a evolução das grandezas físicas no tempo para solucionar as equações diferenciais que governam o sistema. Essa abordagem foi essencial para capturar a dinâmica dos fluidos e suas interações com superfícies rígidas. No entanto, uma escolha inadequada do método de integração ou do passo de tempo poderia comprometer a precisão dos resultados e causar instabilidades numéricas, como oscilações artificiais ou divergências nos valores computados, o que afetaria a confiabilidade das simulações (LIU; LIU, 2003).

Nesta tese, adotou-se o integrador Avaliar-Predizer-Avaliar-Corriger (EPEC) (RAMACHANDRAN; PURI, 2019), uma extensão aprimorada do integrador Prever-Avaliar-Corriger (PEC) (MONAGHAN, 2005), amplamente utilizado na formulação SPH. O integrador EPEC adicionou uma etapa de correção ao ciclo do PEC, o que proporcionou maior precisão nas soluções e melhor estabilidade numérica. Tais características mostraram-se especialmente relevantes em simulações com interações complexas entre partículas, como no caso da adesão bacteriana a

superfícies rugosas.

As equações diferenciais governantes foram resolvidas a cada passo de tempo conforme as seguintes etapas (RAMACHANDRAN; PURI, 2019):

- **Avaliar:** Nesta etapa inicial, calculou-se  $f_n$  no tempo  $t_n$ , determinando as forças atuantes, como pressão, viscosidade e forças externas. Essa avaliação inicial foi crucial para estimar corretamente as interações entre partículas;
- **Predizer:** Com base nas forças calculadas, atualizaram-se as posições das partículas conforme  $y_{n+1} = y_n + \Delta t \cdot f_n$ , em um processo semelhante ao método de Euler. Essa predição forneceu uma estimativa inicial para a evolução do sistema;
- **Avaliar:** Após a predição, recalculou-se as forças  $f_{n+1}$  com base nas novas posições previstas  $y_{n+1}$ . Adicionalmente, ajustaram-se as velocidades com base nas forças atualizadas, assegurando maior precisão na representação do movimento das partículas;
- **Corrigir:** Por fim, ajustaram-se as posições das partículas utilizando  $y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2}(f_n + f_{n+1})$ , o que incorporou uma média ponderada das forças inicial e recalculada. Esse ajuste final reduziu erros acumulados e preveniu fenômenos indesejados, como a interpenetração de partículas.

Esse ciclo repetiu-se a cada passo de tempo, permitindo que o sistema evoluísse de forma estável e consistente. A combinação das etapas do integrador EPEC proporcionou maior robustez às simulações (RAMACHANDRAN; PURI, 2019), mostrando-se particularmente adequada para problemas com interações complexas, como os estudados nesta tese.

#### 6.2.2.6 Cálculo Adaptativo do Passo de Tempo

Na formulação WCSPH, o cálculo do passo de tempo desempenhava um papel essencial para assegurar a estabilidade e a precisão das simulações numéricas. Esse passo de tempo, representado por  $\Delta t$ , era limitado principalmente pela condição de estabilidade numérica conhecida como Condição Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Essa condição estabelecia um limite superior para  $\Delta t$  com base em fatores como a velocidade do som no fluido, a velocidade relativa entre partículas e a distância mínima entre elas.

Além disso, interações adicionais, como forças de interação entre fluido e superfície, também influenciavam o cálculo do passo de tempo, especialmente em simulações envolvendo

superfícies rugosas. Essas interações podiam reduzir o valor de  $\Delta x$ , exigindo, assim, um cálculo mais cuidadoso de  $\Delta t$  para garantir a estabilidade da simulação (RAMACHANDRAN et al., 2021). Dessa forma, a escolha adequada de  $\Delta t$  não apenas garantia a estabilidade computacional, mas também impactava diretamente a eficiência do processo de simulação.

A condição CFL assegurava que as informações fossem propagadas adequadamente entre as partículas do fluido, prevenindo sobreposições indesejadas e garantindo a convergência dos resultados numéricos. Essa condição era expressa pela seguinte equação:

$$\frac{c \cdot \Delta t}{\Delta x} \leq C_{max}, \quad (6.9)$$

em que  $c$  representava a velocidade do som no fluido,  $\Delta t$  correspondia ao passo de tempo,  $\Delta x$  é o passo espacial, e  $C_{max}$  representava o número de Courant máximo. O valor típico de  $C_{max}$  era definido como 1, ou ligeiramente superior, dependendo do método empregado e do nível de precisão requerido (KOSHIZUKA; OKA, 1996).

No contexto de superfícies rugosas,  $\Delta x$  era influenciado pela rugosidade, e valores muito pequenos exigiam passos de tempo reduzidos para manter a estabilidade numérica (KOSHIZUKA; OKA, 1996). Além disso, a presença de forças de interação entre o fluido e a superfície (ou a bactéria) também afetava o comportamento dinâmico do sistema, exigindo um ajuste cuidadoso de  $\Delta t$ .

#### 6.2.2.7 Condições Iniciais e de Contorno

As condições de contorno foram definidas pelas condições iniciais e pela rugosidade da superfície. A posição da célula esférica e as propriedades do fluido, como densidade e viscosidade, foram determinadas pela geometria rugosa do substrato (MONAGHAN, 2005). A célula foi inicializada com uma velocidade, enquanto o fluido ficou inicialmente em repouso (LIU; LIU, 2003).

A superfície rugosa foi modelada por partículas fixas, e a interação entre o fluido e a superfície foi tratada com condições de não penetração (MONAGHAN, 2005). A interação entre a bactéria e o fluido foi regida pelo potencial de LJ, considerando o movimento relativo e os efeitos da rugosidade (MONAGHAN, 2005).

A aplicação da correção XSPH melhorou a estabilidade numérica e preveniu a interpenetração entre partículas, aumentando a robustez da simulação (AKINCI et al., 2012).

### 6.2.2.8 Pseudocódigo da Interação Superfície e Fluido

---

**Algoritmo 2:** Simulação da interação superfície e fluido com WCSPH, integração EPEC, correção XSPH e passo de tempo adaptativo.

---

**Data:** Listas de partículas do fluido e da superfície, propriedades físicas  $(m, \nu, \rho_0, h)$ , parâmetros do método  $(\phi, C_{max}, c)$ , tempo final  $T_{final}$ .

**Result:** Posições e velocidades atualizadas ao longo do tempo.

```

1 while  $t < T_{final}$  do
    // 1. Atualizar densidade com equação da continuidade
2   foreach partícula  $i$  do
3      $\frac{D\rho_i}{Dt} = \rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_i - v_j) \cdot \nabla_i W_{ij};$ 
4      $\rho_i \leftarrow \rho_i + \frac{D\rho_i}{Dt} \cdot \Delta t;$ 
    // 2. Calcular forças com equação do movimento
5   foreach partícula  $i$  do
6      $p_i \leftarrow c^2(\rho_i - \rho_0);$ 
7      $a_i \leftarrow -\sum_j m_j \left( \frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} + g_i;$ 
    // 3. Predição (EPEC)
8    $v_i^* \leftarrow v_i + a_i \cdot \Delta t;$ 
9    $x_i^* \leftarrow x_i + v_i \cdot \Delta t;$ 
    // 4. Reavaliação com  $x_i^*$ 
10  (repetir cálculo de forças);
    // 5. Correção
11   $v_i \leftarrow \frac{1}{2}(v_i + v_i^* + a_i \cdot \Delta t);$ 
12   $x_i \leftarrow \frac{1}{2}(x_i + x_i^* + v_i \cdot \Delta t);$ 
    // 6. Correção XSPH
13   $v_i \leftarrow v_i + \phi \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_j - v_i) W_{ij};$ 
    // 7. Cálculo de  $\Delta t$  adaptativo
14   $\Delta t \leftarrow C_{max} \cdot \min\left(\frac{h}{c+|v|}, \frac{h^2}{\nu}, \sqrt{\frac{h}{|a|}}\right);$ 
15  Atualizar tempo:  $t \leftarrow t + \Delta t;$ 

```

---

O pseudocódigo apresentado sintetiza, de maneira estruturada, os principais passos da metodologia utilizada na simulação da interação entre a superfície e o fluido. Nele, observa-se a integração da formulação WCSPH, do esquema de integração temporal EPEC, da correção de velocidade por XSPH e do cálculo adaptativo do passo de tempo baseado na condição

CFL. Essa abordagem integrada possibilitou assegurar a estabilidade numérica e a precisão das simulações, ao mesmo tempo em que respeitou as restrições físicas impostas pelo modelo. O pseudocódigo, portanto, representa um guia consolidado das etapas de atualização das propriedades das partículas ao longo da simulação.

### 6.2.3 Interação Bactéria e Fluido

A interação entre a célula bacteriana, modelada como corpo rígido, foi simulada por meio de um acoplamento rígido-fluido baseado na formulação SPH de Akinci et al. (2012). Esse modelo considera a interação direta da célula com o fluido circundante e as superfícies do domínio, sendo essa interação fundamental para a descrição da dinâmica de adesão bacteriana.

O acoplamento rígido-fluido permitiu simular o movimento de corpos rígidos, como as bactérias, sob a ação das forças exercidas pelo fluido e das forças de contato com as superfícies, desconsiderando deformações. As colisões foram tratadas pelo método DEM, que modela as forças normais e tangenciais de contato. Essas forças impediram a interpenetração entre os corpos rígidos e as superfícies e descreveram o deslizamento nas regiões de contato.

Além dos movimentos translacionais, o modelo considerou os movimentos rotacionais dos corpos rígidos, os quais influenciaram a troca de momento com o fluido. As equações de movimento que descrevem essas interações foram resolvidas numericamente pela formulação SPH, garantindo uma representação realista da dinâmica das colisões.

A simulação das colisões entre corpos rígidos, aliada à modelagem das interações entre a superfície e o fluido e entre a bactéria e o fluido, foi essencial para compreender o comportamento bacteriano durante a adesão a superfícies. Essa abordagem foi especialmente relevante em superfícies rugosas, nas quais a heterogeneidade estrutural do substrato tornou as interações mais complexas.

A esfera que representa a bactéria no modelo seguiu as equações de movimento para corpos rígidos desenvolvidas por Coumans (2011) e aplicadas por Akinci et al. (2012). O acoplamento rígido-fluido simulou as interações entre o fluido incompressível e os corpos rígidos, garantindo a conservação de massa e momento, além de evitar penetrações indesejadas entre o fluido e os sólidos.

A dinâmica dos corpos rígidos e do fluido foi controlada por partículas de contorno localizadas na superfície dos corpos rígidos, possibilitando a simulação de diferentes geometrias. A correção de densidade, as forças de interação rígido-fluido e as equações de movimento

compuseram a base matemática empregada para descrever essas simulações com precisão.

A seguir, são apresentadas as funções implementadas nesta tese, responsáveis pelo acoplamento rígido-fluido segundo a abordagem de Akinci et al. (2012), com base no exemplo *sphere in vessel* do PySPH.

### 6.2.3.1 Correção da Densidade pela Soma

A densidade de uma partícula fluida foi ajustada pela contribuição dos vizinhos fluidos e dos contornos rígidos segundo Akinci et al. (2012). Essa integração garantiu estabilidade e precisão nas simulações ao capturar efeitos locais, como pressão e fluxo, e representar os fenômenos físicos de forma mais realista.

No modelo proposto, a formulação descreveu as interações hidrodinâmicas entre o fluido e a bactéria (corpo rígido), sendo essencial em geometrias complexas, como superfícies rugosas. A correção da densidade próxima às fronteiras possibilitou modelar de forma realista as forças de pressão e viscosidade, essenciais na adesão bacteriana.

A densidade corrigida no fluido foi determinada pela equação:

$$\rho_{f_i} = m_{f_i} \sum_j W_{ij} + m_{f_i} \sum_k W_{ik}, \quad (6.10)$$

onde  $m_{f_i}$  é a massa da partícula fluida  $i$ ,  $W_{ij}$  representa a interação com as partículas vizinhas  $j$  e  $W_{ik}$  a interação com as partículas de contorno rígido  $k$ .

Segundo Akinci et al. (2012), essa equação considera as contribuições dos vizinhos fluidos e das partículas de contorno. Entretanto, superestimou a densidade em amostragens não uniformes, como em superfícies rugosas, provocando forças de pressão excessivas e instabilidade por desconsiderar explicitamente o volume das partículas de contorno.

Para superar essa limitação, foi implementada a reformulação proposta por Akinci et al. (2012), que incluiu o volume das partículas de contorno na equação:

$$\rho_{f_i} = m_{f_i} \sum_j W_{ij} + \sum_k \psi_{b_k}(\rho_{0_i}) W_{ik}, \quad (6.11)$$

com

$$\psi_{b_k}(\rho_{0_i}) = \rho_0 V_{b_i}, \quad V_{b_i} = \frac{1}{\sum_k W_{ik}}, \quad (6.12)$$

onde  $V_{b_i}$  representa o volume associado à partícula de contorno  $b_i$  e  $\rho_{0_i}$  a densidade de repouso do fluido em interação com o corpo rígido.

A inclusão do volume das partículas de contorno foi relevante para representar a interação entre o fluido, a bactéria e a superfície rugosa, aumentando a precisão das forças de interação e mitigando instabilidades em distribuições não homogêneas, resultando em uma simulação mais estável e confiável.

A Figura 26 ilustra o impacto da correção da densidade ao comparar a variação da densidade próxima à superfície com e sem a correção. A consideração do volume das partículas de contorno melhorou a representação das interações entre o fluido e a superfície, promovendo maior estabilidade e precisão ao modelo.

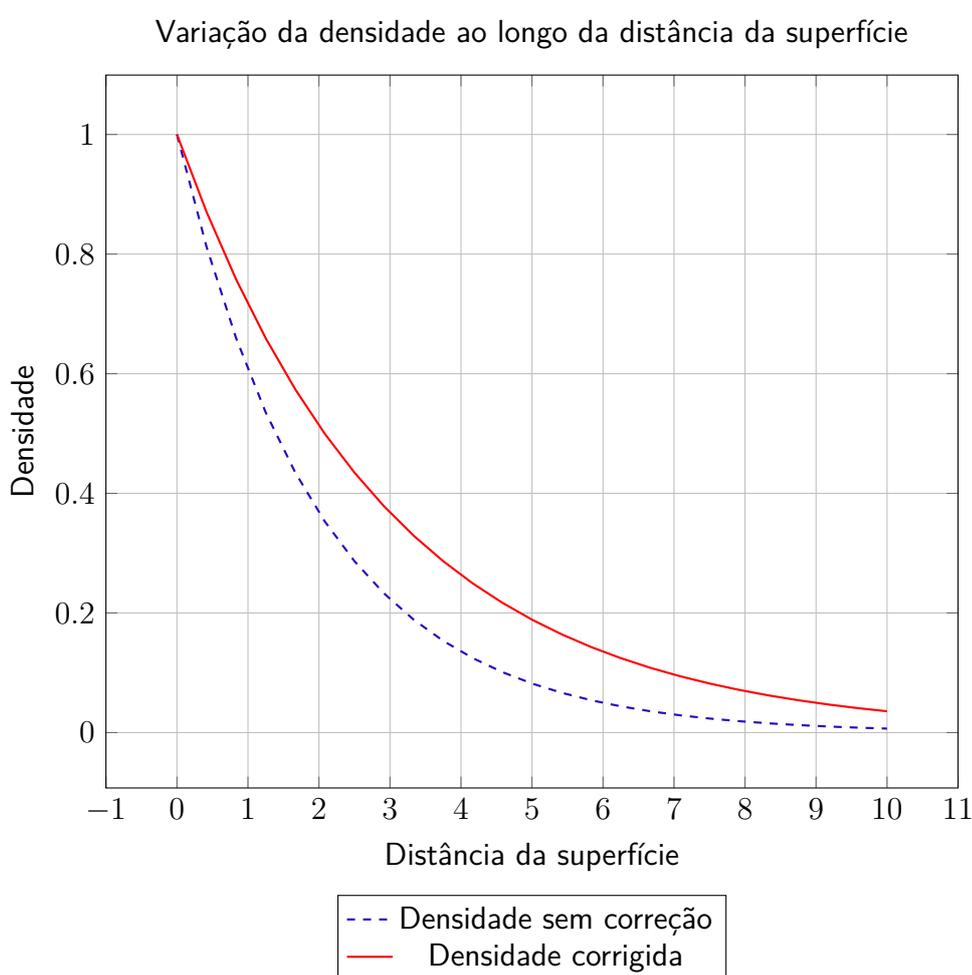


Figura 26 – Variação da densidade ao longo da distância da superfície, com e sem a correção de densidade.

**Fonte:** Da autora

### 6.2.3.2 Força de Pressão entre Fronteira e Fluido

A força de pressão entre o fluido e a superfície rígida foi fundamental para garantir interações realistas no modelo SPH (AKINCI et al., 2012), evitando a penetração e preservando

as propriedades do fluido (densidade e pressão). Na adesão bacteriana, essa força mediou a interação entre o fluido e a bactéria (corpo rígido), assegurando estabilidade e consistência física, especialmente em superfícies geometricamente complexas, como as rugosas.

A força aplicada por uma partícula de contorno  $b_j$  a uma partícula fluida  $f_i$  é expressa por:

$$F_{f_i \leftarrow b_j}^p = -m_{f_i} \psi_{b_j}(\rho_{0_i}) \left( \frac{p_{f_i}}{\rho_{f_i}^2} \right) \nabla W_{ij}, \quad (6.13)$$

em que  $\psi_{b_j}(\rho_{0_i})$  corresponde ao termo que incorpora o volume e a densidade da partícula de contorno,  $p_{f_i}$  representa a pressão da partícula fluida,  $\rho_{f_i}$  indica sua densidade, e  $\nabla W_{ij}$  denota o gradiente da função kernel.

Para garantir a conservação do momento na interação, a força de pressão é calculada de forma simétrica, conforme a equação:

$$F_{b_j \leftarrow f_i}^p = -F_{f_i \leftarrow b_j}^p. \quad (6.14)$$

Essa abordagem é indispensável para garantir que as interações entre o fluido, a bactéria e a superfície rugosa sejam fisicamente consistentes e estáveis. Tal consistência é essencial para modelar com precisão a adesão bacteriana e os efeitos das interações em sistemas multifísicos, como o investigado neste estudo.

### 6.2.3.3 Momentos de Força ou Torques

No modelo de adesão bacteriana em superfícies rugosas, os torques foram utilizados para simular a rotação da bactéria (corpo rígido). Segundo Akinci et al. (2012), esses torques resultaram das interações entre o fluido e a fronteira, representando a rotação da bactéria ao interagir com o fluido e a superfície rugosa.

Esses torques foram gerados pelas forças totais aplicadas nas partículas de contorno da bactéria. As equações que descrevem essas forças são:

$$F_{f_i}^{total} = \sum_j \left( F_{f_i \leftarrow b_j}^p + F_{f_i \leftarrow b_j}^v \right) \quad \text{e} \quad F_{b_i}^{total} = \sum_j \left( F_{b_i \leftarrow f_j}^p + F_{b_i \leftarrow f_j}^v \right), \quad (6.15)$$

em que  $F^p$  e  $F^v$  representam, respectivamente, as forças de pressão e de viscosidade entre as partículas de fluido  $f_i$  e as partículas de fronteira  $b_j$ . Essas forças foram tratadas de forma simétrica, assegurando o equilíbrio e a precisão do modelo, conforme indicado por Akinci et al. (2012).

No modelo proposto, as forças totais  $F^{total} f_i$  e  $F^{total} b_i$  foram aplicadas, respectivamente, às partículas de fluido e às partículas de contorno, simulando a interação entre o fluido e a bactéria na presença de superfícies rugosas. A força total  $F_{rigid}$  que atuou sobre a bactéria correspondeu à soma de todas as forças nas partículas de contorno:

$$F_{rigid} = \sum_i F_{b_i}^{total}. \quad (6.16)$$

Adicionalmente, o torque total  $\tau_{rigid}$  sobre a bactéria foi calculado como a soma dos produtos vetoriais entre a posição relativa de cada partícula de contorno  $i$ , em relação ao centro de massa  $x^{cm}$ , e a força aplicada nessa partícula:

$$\tau_{rigid} = \sum_i (x_i - x^{cm}) \times F_{b_i}^{total}. \quad (6.17)$$

Esses torques e forças foram aplicados ao corpo rígido (bactéria), permitindo o cálculo de seu movimento rotacional durante o processo de adesão e de interação com a superfície rugosa (AKINCI et al., 2012).

No contexto computacional, os momentos de força foram integrados ao modelo com o objetivo de prever a evolução do movimento rotacional da bactéria ao longo do tempo, assegurando que as interações entre o fluido, a bactéria e a superfície rugosa fossem fisicamente consistentes. Essa abordagem não apenas garantiu a estabilidade e a precisão do modelo, mas também foi essencial para simular a adesão bacteriana de maneira mais realista, considerando as complexidades dinâmicas do sistema, e, por conseguinte, avançar na compreensão dos processos de adesão em superfícies rugosas.

#### 6.2.3.4 Força Aplicada ao Corpo Rígido

Em simulações de corpos rígidos acoplados a fluidos, a aplicação de uma força externa uniforme a todas as partículas do corpo rígido desempenhou um papel fundamental na simulação de efeitos globais, como a gravidade ou outras forças constantes (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016). Essa abordagem garantiu que todas as partículas do corpo experimentassem a mesma aceleração, mantendo a uniformidade da força em termos de direção e magnitude.

Conforme descrito por Ramachandran et al. (2018), essa força foi aplicada de forma global, sem interferir nas interações locais de colisão ou de contato entre o corpo rígido e outras entidades do sistema, como o fluido ou as fronteiras, permitindo que o movimento do corpo

rígido fosse influenciado pela força externa sem comprometer a precisão das interações hidrodinâmicas no modelo.

Forças globais uniformes, como a gravidade, são amplamente utilizadas para representar o peso em simulações (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016). Além disso, outras forças, como acelerações uniformes ou resistência ao movimento, podem ser modeladas para simular cenários específicos, como o deslocamento em fluidos viscosos ou a aplicação de forças externas de tração.

No contexto do modelo de adesão bacteriana, a gravidade, por exemplo, foi crucial para descrever o movimento da bactéria, tratada como corpo rígido, ao interagir com o fluido. Essas forças influenciaram tanto o movimento de translação quanto o de rotação da bactéria, aspectos essenciais para a modelagem da dinâmica de adesão ao fluido e à superfície rugosa.

#### 6.2.3.5 *Colisão entre Corpos Rígidos*

No modelo proposto, a colisão entre corpos rígidos foi simulada com o DEM, conforme descrito por Garg et al. (2012) e Akinci et al. (2012). Adaptado para as interações entre a bactéria e o fluido, esse método foi essencial para descrever o movimento da bactéria na adesão a superfícies rugosas. As forças de contato foram modeladas por um sistema mola-amortecedor, com a força normal evitando penetração e regulando a interação com as irregularidades da superfície, e a força tangencial controlando o deslizamento da bactéria sobre a superfície (GARG et al., 2012), (AKINCI et al., 2012).

A bactéria, modelada como corpo rígido de partículas esféricas, interagiu no DEM por forças normais e tangenciais durante colisões com a superfície ou outras partículas, capturando sua dinâmica (GARG et al., 2012). Seu movimento era influenciado pelas forças hidrodinâmicas do fluido, como pressão e viscosidade (LIU; LIU, 2003). A equação de movimento combinava as forças de contato do DEM com as hidrodinâmicas, considerando as condições locais do fluido e as interações com a superfície (AKINCI et al., 2012). Essas forças alteravam a velocidade e o padrão de movimento da bactéria, influenciando sua adesão ou deslizamento (AKINCI et al., 2012).

Durante a simulação, o DEM calculava as velocidades e posições da bactéria a cada passo de tempo, considerando as interações internas entre suas partículas e o fluido (GARG et al., 2012), (AKINCI et al., 2012). As forças de contato eram ajustadas conforme as condições do fluido, e o arraste gerado na interação entre a bactéria e o fluido impactava tanto a adesão

quanto o movimento da bactéria (KIM; KARRILA, 2013). Em regiões de alto fluxo, o fluido afastava a bactéria da superfície, enquanto em áreas de baixo fluxo o movimento era menos restrito (LAUGA; POWERS, 2009).

A interação da bactéria com o fluido foi ajustada com base no fluxo, viscosidade local e posição da bactéria, garantindo uma simulação realista (LIU; LIU, 2003), (MORRIS; FOX; ZHU, 1997). O DEM regulava o movimento da bactéria em superfícies rugosas, incorporando o impacto das forças hidrodinâmicas na adesão (GARG et al., 2012), (AKINCI et al., 2012). O fluido alterava o padrão de contato, influenciando diretamente a adesão, que era governada pela combinação das forças de contato do DEM e as condições do fluido (MARSHALL et al., 2003). As equações do DEM incluíam forças normais e tangenciais durante as colisões e as equações de movimento das partículas, possibilitando uma descrição precisa da dinâmica da bactéria. O modelo representou realisticamente a capacidade da bactéria de se mover, aderir ou deslizar, conforme as condições do sistema.

A posição e as velocidades das partículas evoluíam conforme as leis de Newton. Para a partícula  $i$ , as equações de movimento foram expressas por Garg et al. (2012) da seguinte forma:

$$m_i \cdot a_i = F_i, \quad (6.18)$$

em que  $m_i$  é a massa da partícula  $i$ ,  $a_i$  sua aceleração e  $F_i$  a soma das forças que atuam sobre ela, incluindo interações entre partículas, forças externas (como gravidade ou pressão) e forças de contato derivadas do DEM.

A força normal de contato entre duas partículas foi modelada por uma combinação de mola (restauração) e amortecedor (dissipação), conforme descrito por Garg et al. (2012):

$$F_n = -k_n \cdot \delta - \gamma_n \cdot v_n, \quad (6.19)$$

em que  $k_n$  é o coeficiente de rigidez normal,  $\delta$  é a sobreposição entre as partículas,  $\gamma_n$  é o coeficiente de amortecimento normal e  $v_n$  é a velocidade relativa na direção normal de contato.

A força tangencial também foi modelada por mola e amortecedor, considerando o deslocamento tangencial acumulado, conforme Garg et al. (2012):

$$F_t = -k_t \cdot \delta_t - \gamma_t \cdot v_t, \quad (6.20)$$

onde  $k_t$  é o coeficiente de rigidez tangencial,  $\delta_t$  é o deslocamento tangencial acumulado,  $\gamma_t$  é o coeficiente de amortecimento tangencial e  $v_t$  é a velocidade relativa na direção tangencial.

A sobreposição entre as partículas  $i$  e  $j$  foi definida por Garg et al. (2012) como:

$$\delta = \frac{D_i - D_j}{2} - |x_i - x_j|, \quad (6.21)$$

onde  $D_i$  e  $D_j$  são os diâmetros das partículas  $i$  e  $j$ , e  $x_i$  e  $x_j$  são suas posições.

A força total de contato  $F_{contato}$  sobre uma partícula foi calculada como a soma das forças normais e tangenciais:

$$F_{contato} = F_n + F_t. \quad (6.22)$$

O torque total  $T_{total}$  sobre uma partícula foi obtido pela soma dos torques gerados pelas forças de contato:

$$T_{total} = \sum_j (x_i - x_{cm}) \times F_{contato}, \quad (6.23)$$

onde  $x_{cm}$  é o centro de massa da partícula, garantindo o cálculo do torque em relação ao ponto de referência adequado.

#### 6.2.3.6 Movimento de um Corpo Rígido

No modelo SPH, o movimento de um corpo rígido é governado por forças hidrodinâmicas, de contato e gravitacionais, envolvendo translação e rotação (RAMACHANDRAN et al., 2018). A velocidade de um ponto no corpo rígido é a soma da velocidade do centro de massa e da velocidade rotacional, dependente da posição relativa em relação ao centro de massa:

$$v_{ponto} = v_{cm} + \omega \times r, \quad (6.24)$$

onde  $v_{cm}$  é a velocidade do centro de massa,  $\omega$  é a velocidade angular e  $r$  é o vetor posição relativo ao centro de massa.

A dinâmica da bactéria rígida foi descrita pelas interações com as partículas de fluido e a superfície rugosa. As forças hidrodinâmicas, incluindo pressão e viscosidade, foram calculadas para cada partícula de fluido interagindo com o corpo rígido. A força total  $F_{fluido}$  e o torque  $\tau_{fluido}$  sobre o corpo foram computados pelas expressões:

$$F_{\text{fluido}} = \sum_i (F_{\text{pressao},i} + F_{\text{viscosidade},i}), \quad (6.25)$$

$$\tau_{\text{fluido}} = \sum_i r_i \times F_{\text{fluido},i}, \quad (6.26)$$

onde  $r_i$  representa o vetor posição relativo ao centro de massa da bactéria.

As forças de contato, modeladas com base no método DEM, impedem a penetração do corpo na superfície e contribuem para a adesão da bactéria à superfície rugosa. A força gravitacional afeta o movimento translacional do centro de massa.

As equações que governam o movimento translacional e rotacional da bactéria rígida são dadas por:

- Translação:

$$a = \frac{F_{\text{total}}}{m}, \quad v_{\text{nova}} = v + a\Delta t, \quad r_{\text{nova}} = r + v\Delta t, \quad (6.27)$$

onde  $a$  é a aceleração translacional,  $F_{\text{total}}$  é a força total aplicada,  $m$  é a massa da bactéria,  $v_{\text{nova}}$  é a nova velocidade e  $r_{\text{nova}}$  é a nova posição do centro de massa.

- Rotação:

$$\alpha = I^{-1} \cdot \tau, \quad \omega_{\text{nova}} = \omega + \alpha\Delta t, \quad R_{\text{nova}} = R + \omega\Delta t, \quad (6.28)$$

onde  $\alpha$  é a aceleração angular,  $I^{-1}$  é a inversa do tensor de inércia,  $\tau$  é o torque total aplicado,  $\omega_{\text{nova}}$  é a nova velocidade angular e  $R_{\text{nova}}$  é a nova orientação do corpo rígido.

### 6.2.3.7 Cálculo do Passo de Corpo Rígido Utilizando o Método Runge-Kutta de Segunda Ordem (RK2)

O método Runge-Kutta de Segunda Ordem (RK2) foi utilizado no PySPH para integrar o movimento de corpos rígidos, considerando as forças hidrodinâmicas, os torques de contato e os efeitos gravitacionais (RAMACHANDRAN et al., 2018). Esse método demonstrou-se eficaz na modelagem de sistemas complexos, como o acoplamento rígido-fluido e as interações com superfícies rugosas, permitindo previsões precisas do movimento no contexto da dinâmica de fluidos.

De acordo com Burden, Faires e Burden (2016), o RK2 é um método de dois estágios: inicialmente, realiza-se a previsão do estado do sistema com base nas forças e torques iniciais; em seguida, procede-se à correção do estado por meio da média entre os valores previstos e

recalculados, proporcionando uma estimativa mais precisa sem incorrer no custo computacional dos métodos de ordem superior.

No presente modelo de adesão bacteriana a uma superfície rugosa, o método RK2 foi empregado para integrar as equações do movimento linear e angular, assegurando estabilidade numérica. As forças hidrodinâmicas — como as de pressão e viscosidade — foram tratadas por meio do método WCSPH (AKINCI et al., 2012), enquanto as forças de contato com a superfície permitiram o cálculo da força total  $F_t$  e do torque  $\tau$  sobre o corpo rígido.

O procedimento de integração por meio do método RK2 seguiu os seguintes passos:

- Previsão (Passo 1): Estimou-se o estado futuro do corpo rígido a partir das forças e torques iniciais.

Para o movimento linear:

$$v_{predito} = v + a\Delta t, \quad r_{predito} = r + v\Delta t, \quad (6.29)$$

em que  $a = \frac{F_t}{m}$  representa a aceleração linear.

Para o movimento angular:

$$\omega_{predito} = \omega + \alpha\Delta t, \quad R_{predito} = R + \omega\Delta t, \quad (6.30)$$

sendo  $\alpha = I^{-1} \cdot \tau$  a aceleração angular.

- Correção (Passo 2): As forças  $F_t$  e os torques  $\tau$  foram recalculados com base no estado previsto, e, posteriormente, as velocidades e posições foram corrigidas por meio da média ponderada entre os estados inicial e previsto.

Para o movimento linear corrigido:

$$v_{nova} = v + \frac{a_{inicial} + a_{predito}}{2}\Delta t, \quad r_{novo} = r + \frac{v_{inicial} + v_{predito}}{2}\Delta t. \quad (6.31)$$

Para o movimento angular corrigido:

$$\omega_{nova} = \omega + \frac{\alpha_{inicial} + \alpha_{predito}}{2}\Delta t, \quad R_{nova} = R + \frac{\omega_{inicial} + \omega_{predito}}{2}\Delta t. \quad (6.32)$$

Após a etapa de correção, as novas velocidades linear e angular, bem como as novas posições e orientações do corpo rígido, foram atualizadas. Esse processo foi repetido a cada passo de tempo  $\Delta t$ , permitindo capturar com precisão as interações dinâmicas entre o corpo rígido, o fluido e a superfície rugosa.

A combinação do método RK2 com as forças específicas envolvidas no sistema possibilitou uma simulação realista da adesão bacteriana em superfícies rugosas, oferecendo uma descrição detalhada do comportamento do corpo rígido em cenários complexos.

#### 6.2.3.8 Cálculo do Passo de Tempo para a Interação Rígido-Fluido no SPH

Em simulações de acoplamento rígido-fluido, o cálculo do passo de tempo  $dt$  mostrou-se fundamental para assegurar a precisão e a estabilidade numérica. No exemplo *sphere in vessel* do PySPH (RAMACHANDRAN et al., 2018),  $dt$  foi determinado com base na resolução espacial  $dx$ , na velocidade do som  $c_0$  e em um parâmetro de suavização  $hdx$ , conforme a seguinte expressão:

$$dt = \frac{0.125 \times dx \times hdx}{c_0 \times 1.1}. \quad (6.33)$$

Nessa equação,  $dx$  representa o espaçamento entre as partículas,  $hdx$  é um fator de suavização, e  $c_0$  corresponde à velocidade do som no fluido. O fator 1,1 foi incluído com o intuito de melhorar a estabilidade numérica.

Essa formulação permitiu garantir a estabilidade ao levar em conta a resposta dinâmica do fluido e a transferência de momento para o corpo rígido, prevenindo instabilidades numéricas ou movimentos não físicos. No modelo proposto, que simula a adesão de uma bactéria esférica rígida a uma superfície rugosa, o cálculo do passo de tempo foi ajustado de modo a equilibrar precisão e eficiência, considerando-se a formulação WCSPH de acordo com o que foi proposto pelo modelo de Akinci et al. (2012) e a complexidade topológica da superfície rugosa.

Ao adaptar  $dt$  às características específicas do sistema, essa abordagem possibilitou a realização de simulações consistentes e confiáveis das interações entre o corpo rígido e o fluido.

#### 6.2.3.9 Pseudocódigo da Interação Bactéria e Fluido

O pseudocódigo a seguir apresenta a simulação da interação entre uma bactéria esférica rígida e o fluido, com base na formulação WCSPH, integração RK2 e critério de passo de tempo do exemplo *sphere in vessel* do PySPH.

---

**Algoritmo 3:** Simulação da interação entre bactéria rígida e fluido utilizando WCSPH e integração temporal RK2.

---

**Data:** Partículas do fluido, propriedades físicas do fluido e da bactéria (massa, momento de inércia,  $c_0$ ,  $h$ ,  $dx$ ,  $hdx$ ), tempo final  $T_{final}$ .

**Result:** Evolução temporal das posições, velocidades e rotações da bactéria rígida interagindo com o fluido.

```

1 Calcular  $\Delta t \leftarrow \frac{0.125 \cdot dx \cdot hdx}{1.1 \cdot c_0}$ ;
2 while  $t < T_{final}$  do
    // 1. Cálculo das forças do fluido sobre a bactéria (WCSPH)
3   foreach partícula de fluido  $i$  do
4     | Calcular  $\rho_i$ ,  $p_i$  e  $a_i$  com base nas interações vizinhas (pressão e viscosidade);
5   foreach partícula de fluido próxima à bactéria do
6     | Calcular contribuição de força e torque sobre a bactéria;
    // 2. Cálculo das forças de contato entre bactéria e superfície
7   Identificar colisões e calcular forças normais/tangenciais de contato e torque;
    // 3. Etapa de Previsão (RK2)
8    $a_0 \leftarrow \frac{F_{fluido} + F_{contato} + F_g}{m}$ ;
9    $\alpha_0 \leftarrow I^{-1} \cdot (\tau_{fluido} + \tau_{contato})$ ;
10   $v^* \leftarrow v + a_0 \cdot \Delta t$ ;
11   $r^* \leftarrow r + v \cdot \Delta t$ ;
12   $\omega^* \leftarrow \omega + \alpha_0 \cdot \Delta t$ ;
13   $R^* \leftarrow R + \omega \cdot \Delta t$ ;
    // 4. Etapa de Correção (RK2)
14  Recalcular  $F^*$  e  $\tau^*$  com o estado previsto;
15   $a^* \leftarrow \frac{F_{fluido}^* + F_{contato}^* + F_g}{m}$ ;
16   $\alpha^* \leftarrow I^{-1} \cdot (\tau_{fluido}^* + \tau_{contato}^*)$ ;
17   $v \leftarrow v + \frac{1}{2}(a_0 + a^*) \cdot \Delta t$ ;
18   $r \leftarrow r + \frac{1}{2}(v + v^*) \cdot \Delta t$ ;
19   $\omega \leftarrow \omega + \frac{1}{2}(\alpha_0 + \alpha^*) \cdot \Delta t$ ;
20   $R \leftarrow R + \frac{1}{2}(\omega + \omega^*) \cdot \Delta t$ ;
    // 5. Atualizar tempo
21   $t \leftarrow t + \Delta t$ ;

```

---

## 7 MODELAGEM

### 7.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta a modelagem computacional desenvolvida para representar a adesão bacteriana em superfícies rugosas. Foram detalhados os principais aspectos do cenário simulado, incluindo os parâmetros definidos para a superfície e para a bactéria. Os resultados obtidos foram confrontados com dados experimentais da literatura, possibilitando a avaliação da influência da rugosidade e da distribuição das forças no processo inicial de adesão bacteriana.

A metodologia adotada nesta tese teve como objetivo representar com precisão esse fenômeno, por meio da combinação do método SPH com o potencial de LJ. Esse modelo permitiu uma análise aprofundada das interações intermoleculares entre a bactéria e a superfície, considerando também os efeitos hidrodinâmicos que influenciam a adesão.

### 7.2 CENÁRIO

O cenário de simulação consiste em uma bactéria esférica com diâmetro de  $1\mu\text{m}$  interagindo com amostras de superfícies texturizadas com dimensões de  $5\mu\text{m} \times 5\mu\text{m}$ , selecionadas aleatoriamente a partir dos dados experimentais disponíveis em Lutey et al. (2018). Foram consideradas diferentes classes de texturização, incluindo superfícies do tipo *SPIKE* (estruturas pontiagudas, semelhantes a espinhos), *LIPSS* (do inglês Laser-Induced Periodic Surface Structures, ou estruturas periódicas induzidas por laser) e *NP* (do inglês Nanopillars, ou estruturas em forma de pilar, coluna ou haste em escala nanométrica).

Para fins ilustrativos, a seguir será apresentada uma amostra representativa do tipo *SPIKE*, exibida na Figura 27. Essa amostra aleatória possui uma rugosidade da área da superfície ( $S_a$ ) calculada em  $8,32\mu\text{m}$ , valor que se mantém consistente com os dados reportados por Lutey et al. (2018).

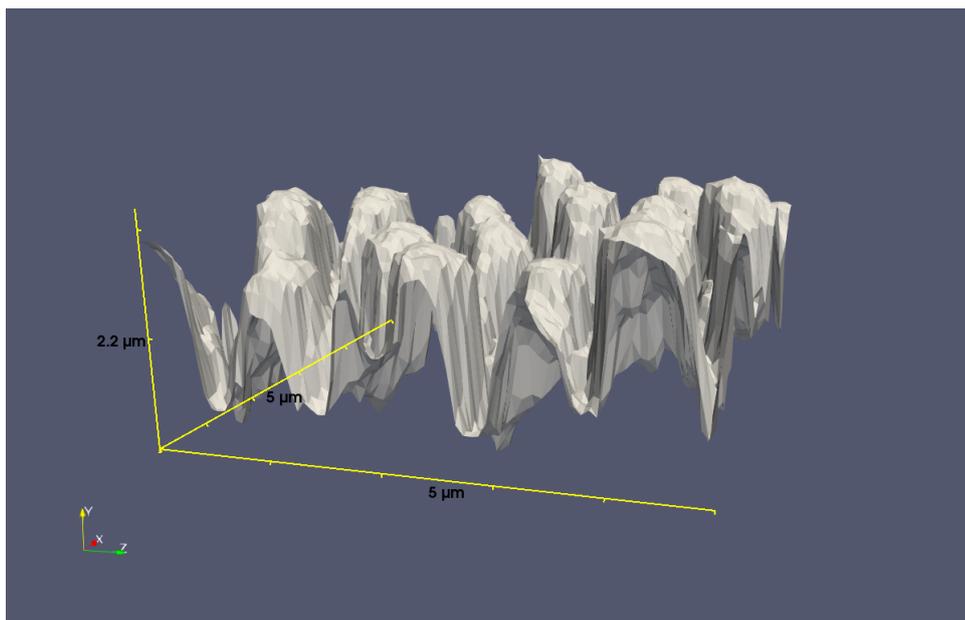


Figura 27 – Exemplo de amostra de superfície aleatória.

Fonte: Da autora

Além disso, uma fase líquida também foi incluída, interagindo com a superfície e a bactéria por meio de um acoplamento rígido-fluido. Para a análise, foram realizadas 200 simulações, cada uma utilizando uma amostra de superfície aleatória e um tempo simulado de 2s, com um passo de tempo de  $1e^{-4}$ s para cada simulação.

### 7.3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Todas as 200 simulações foram executadas em uma Central Processing Unit (CPU), com duração média de aproximadamente 1 hora e 25 minutos por simulação. As simulações foram realizadas em três etapas distintas, considerando os diferentes tipos de superfícies texturizadas: inicialmente, superfícies do tipo *SPIKE*, seguidas pelas superfícies *LIPSS* e, por fim, as superfícies *NP*. Essa abordagem permitiu analisar de forma sistemática a influência da rugosidade e da topografia da superfície sobre a adesão bacteriana.

#### 7.3.1 Resultados para superfícies *SPIKES*

Nesta subseção, são apresentados e discutidos os resultados obtidos para as superfícies do tipo *SPIKE*. A análise concentra-se na distribuição das forças de adesão local e total, destacando comportamentos específicos observados nessas superfícies e comparando-os com

dados da literatura.

Ao analisar a distribuição das forças máximas de atração sobre a bactéria, observou-se que a distribuição é concentrada na extremidade inferior do espectro para as simulações, com apenas alguns casos extremos, como mostrado na Figura 28 referente a apenas 45 simulações.

Maximum Stress Distribution Across Simulations

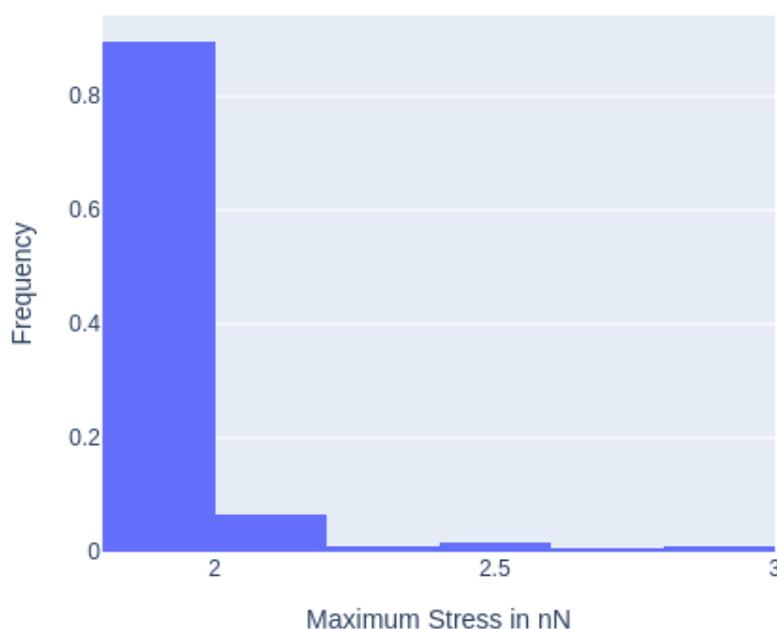


Figura 28 – Distribuição das forças máximas de adesão local para 45 simulações (em nN).

Fonte: Da autora

Os resultados obtidos neste estudo estão em consonância com os apresentados por Lazzini et al. (2021), embora seja possível notar uma pequena diferença na distribuição das forças de adesão. Essa divergência pode ser explicada pelo fato de que as amostras de superfície *SPIKE* utilizadas nesta pesquisa apresentam um coeficiente de rugosidade superficial ( $S_a$ ) consideravelmente maior do que aquele encontrado nas superfícies *LIPSS* e *NP* analisadas por Lazzini et al. (2021). Essa maior rugosidade resulta em uma topografia com vales e picos mais acentuados, o que impacta diretamente na forma como as forças de adesão se distribuem sobre a bactéria.

Além disso, conforme observado por Lutey et al. (2018), a superfície *SPIKE* tende a promover uma adesão bacteriana mais intensa quando comparada às superfícies *LIPSS* e *NP*. Esse padrão comportamental é refletido em nossos resultados, nos quais as forças de

adesão medidas para as amostras *SPIKE* são significativamente mais elevadas. Tal constatação está evidenciada na Figura 29, reforçando a relação direta entre a rugosidade da superfície e a intensidade das forças de atração bacteriana, e confirmando a relevância do estudo das características topográficas para a compreensão do processo inicial de adesão bacteriana.

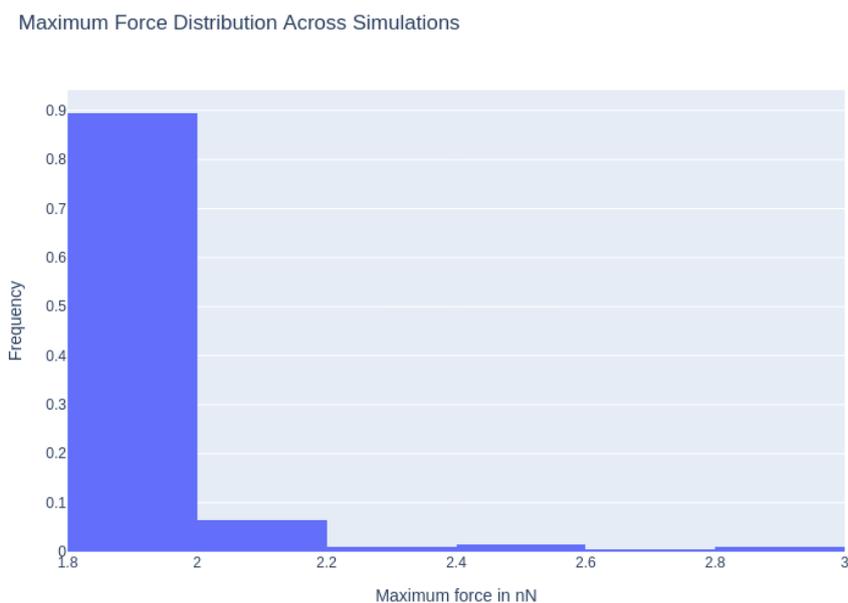


Figura 29 – Distribuição das forças locais máximas para as 200 simulações (em nN).

Fonte: Da autora

A distribuição das forças totais de adesão sobre a bactéria, ilustrada na Figura 30, apresenta um comportamento que se aproxima daquele reportado por Lazzini et al. (2021) em sua Figura 5. Essa semelhança sugere que os padrões de interação e as magnitudes das forças envolvidas na adesão bacteriana simuladas neste estudo estão em concordância com resultados previamente validados pela literatura. Tal consistência reforça a confiabilidade do modelo desenvolvido para representar as forças de adesão em superfícies rugosas, evidenciando que os mecanismos físicos subjacentes capturados pela modelagem são realistas e coerentes com estudos experimentais e computacionais já estabelecidos.

### Total Forces on Bacteria Surface Distribution Across Simulations

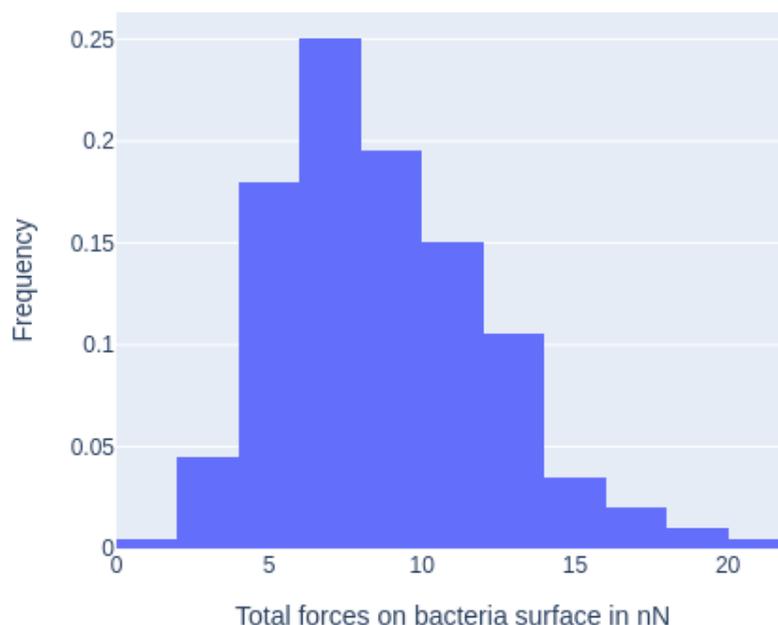


Figura 30 – Distribuição das forças totais de adesão sobre a bactéria nos 200 cenários simulados (nN).

Fonte: Da autora

Em nossos resultados e nos de Lazzini et al. (2021), pode-se observar uma correlação direta entre uma área de contato maior e uma força de atração local menor. Isso ocorre porque, nesses casos, a atração é distribuída por uma maior porção da superfície da bactéria. A Figura 31 ilustra o caso com a menor área de contato.

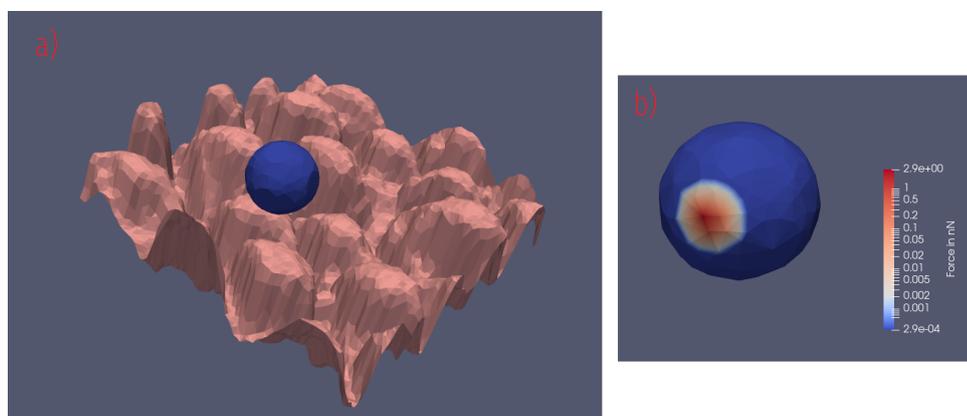


Figura 31 – Representações da bactéria e da superfície para o caso com um único ponto de contato: a) Bactéria e superfície; b) Detalhe rotacionado da bactéria.

Fonte: Da autora

O inverso é observado quando a área de contato é maior (Figura 32).

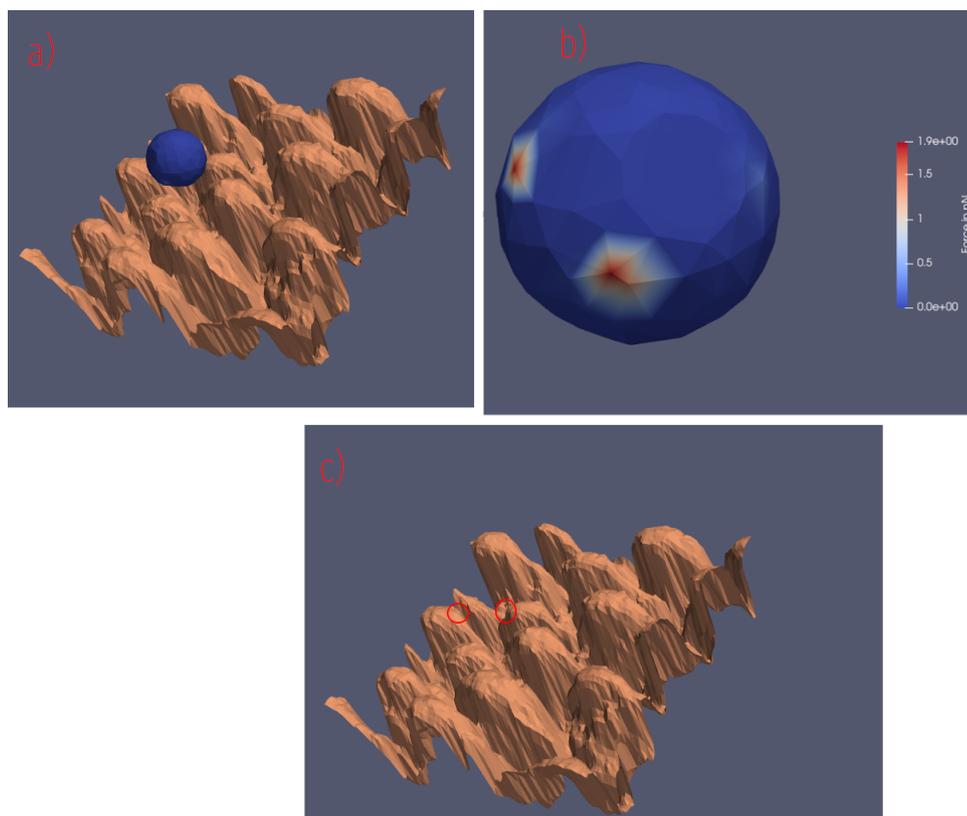


Figura 32 – Representações da bactéria e da superfície para o caso com múltiplas áreas de contato; a) Bactéria e superfície; b) Detalhe rotacionado da bactéria; c) Áreas de contato na superfície destacadas.

Fonte: Da autora

Embora uma área de contato reduzida esteja associada a uma concentração maior de força em nível local, observa-se que a adesão no restante da superfície bacteriana tende a se tornar praticamente inexistente. Esse comportamento sugere que, apesar da presença de uma interação intensa em pontos específicos, o cenário global de adesão se mostra desfavorável para a fixação inicial da bactéria, uma vez que a força total resultante acaba sendo insuficiente para garantir uma ancoragem estável em toda a estrutura celular.

Esse padrão também pode ser evidenciado na distribuição das forças totais que atuam sobre a bactéria, conforme ilustrado na Figura 33, onde essas forças estão agrupadas de acordo com os valores máximos registrados localmente. A análise dessa distribuição revela que os casos em que há uma força máxima mais fraca tendem, em média, a apresentar forças totais mais intensas, indicando uma adesão mais equilibrada e, portanto, potencialmente mais eficaz. Esse resultado reforça a ideia de que não apenas a intensidade pontual das forças, mas também sua distribuição ao longo da superfície bacteriana, desempenha um papel crucial no processo inicial de adesão a superfícies rugosas.

### Total Force vs Maximum Local Force acting on Bacteria

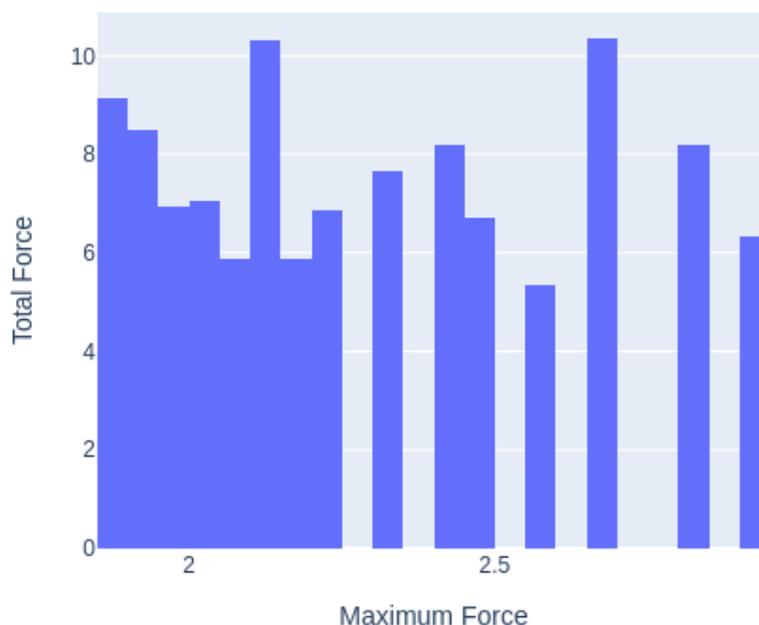


Figura 33 – Distribuição das forças totais de adesão agrupadas pelas forças máximas atuando na superfície da bactéria nos 200 cenários simulados (em nN).

Fonte: Da autora

### 7.3.2 Resultados para superfícies *LIPSS* e *NP*

Nesta subseção, são apresentados os resultados obtidos para as superfícies com padrões menos acentuados de rugosidade, nomeadamente as superfícies *LIPSS* e *NP*. O objetivo é analisar como a topografia mais suave dessas superfícies afeta o comportamento da adesão bacteriana, em comparação com as superfícies mais rugosas simuladas anteriormente.

A Figura 34 ilustra uma simulação representativa da bactéria sobre uma superfície *LIPSS*, em um cenário no qual ocorre apenas um ponto de contato com a superfície. Essa configuração destaca como a menor rugosidade da superfície influencia diretamente o modo como a bactéria interage com a topografia: há menos regiões que favorecem a ancoragem da bactéria, o que leva a interações mais limitadas e localizadas.

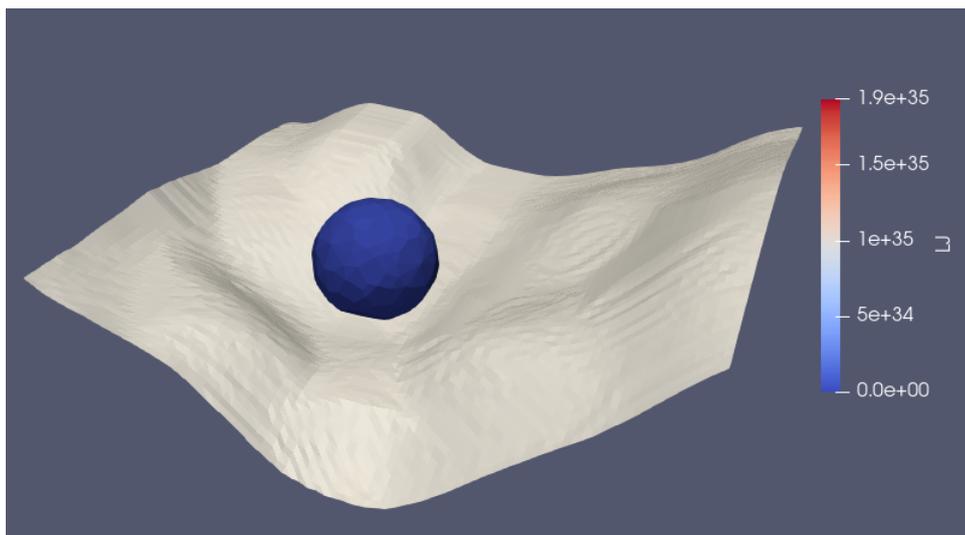


Figura 34 – Representação da bactéria e da superfície *LIPSS* para o caso com um único ponto de contato.

**Fonte:** Da autora

A Figura 35 apresenta a distribuição das forças locais máximas de adesão resultantes das 200 simulações com a superfície *LIPSS*. Observa-se que essas forças são, em média, menos intensas que aquelas obtidas para superfícies mais rugosas, como a *SPIKE*. Essa redução de intensidade está relacionada à menor complexidade geométrica da superfície, que dificulta a formação de múltiplos pontos de contato significativos entre a bactéria e o substrato.

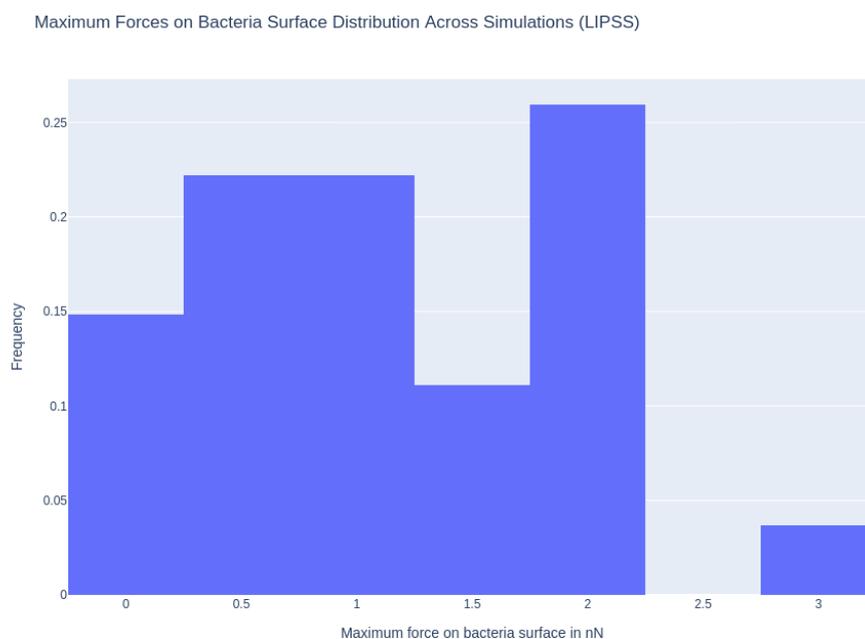


Figura 35 – Distribuição das forças locais máximas para as 200 simulações (em nN), correspondente à superfície *LIPSS*.

**Fonte:** Da autora

Já a Figura 36 mostra a distribuição das forças totais de adesão atuando sobre a bactéria nos mesmos 200 cenários simulados. Nota-se novamente uma tendência de valores mais baixos em comparação com superfícies de rugosidade mais elevada. Isso indica que, além de forças locais mais fracas, o efeito combinado de todas as interações com a superfície também resulta em menor adesão total.

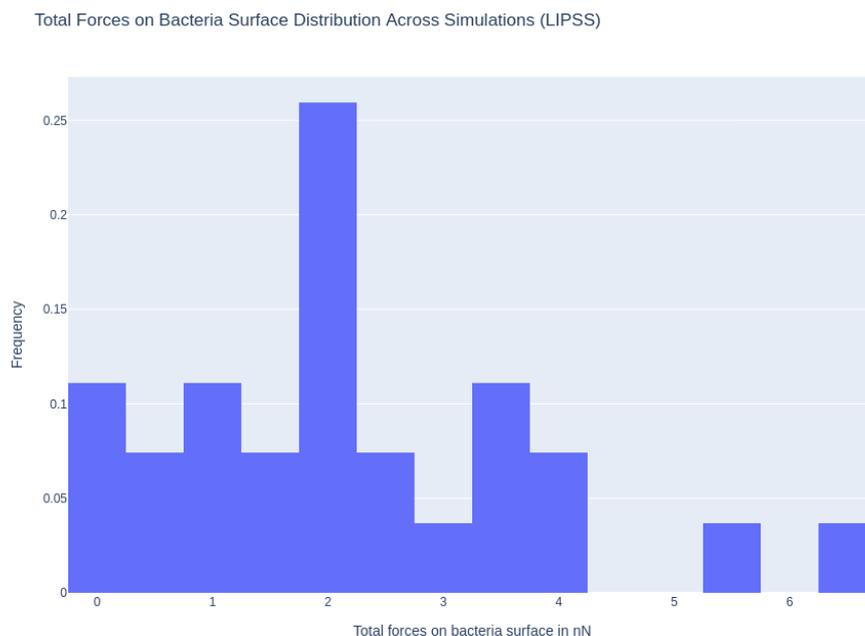


Figura 36 – Distribuição das forças totais de adesão sobre a bactéria nos 200 cenários simulados correspondentes à superfície *LIPSS*.

**Fonte:** Da autora

Dando continuidade à análise das superfícies com menor rugosidade, apresentamos agora os resultados obtidos para a superfície *NP*. Assim como observado nas simulações com a superfície *LIPSS*, espera-se que a menor complexidade topográfica da *NP* também impacte negativamente a adesão bacteriana, uma vez que a bactéria encontra menos possibilidades de interação mecânica com o substrato.

A Figura 37 apresenta um exemplo representativo da interação entre a bactéria e a superfície *NP*, evidenciando uma situação de contato único com a superfície. Assim como no caso da superfície *LIPSS*, observa-se que a célula tende a interagir de forma pontual e superficial com a topografia, sugerindo que há uma limitação física para a formação de múltiplos pontos de contato estáveis.

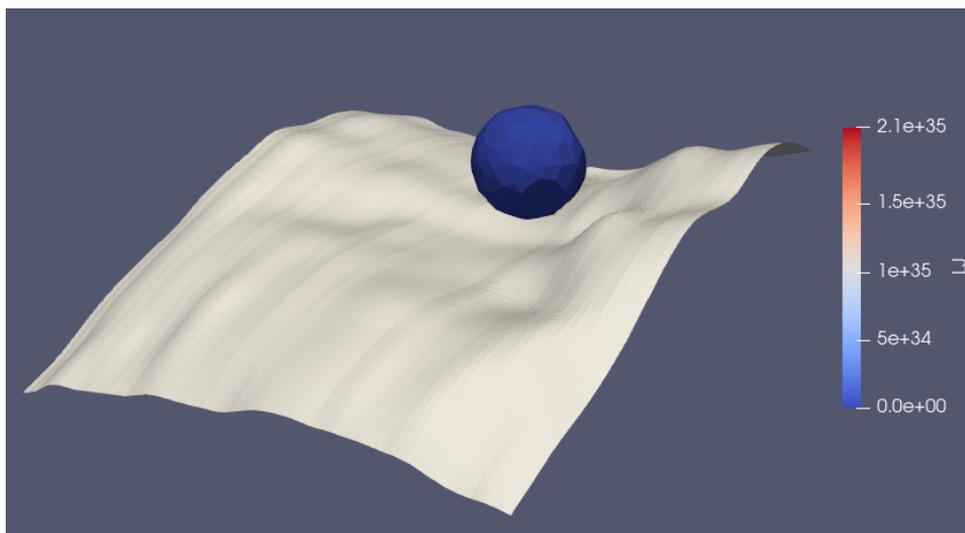


Figura 37 – Representação da bactéria e da superfície *NP* para o caso com um único ponto de contato.

Fonte: Da autora

A distribuição das forças locais máximas obtidas nas 200 simulações é mostrada na Figura 38. De maneira semelhante ao observado na superfície *LIPSS*, as forças resultantes das interações locais na superfície *NP* também se mostraram reduzidas, reforçando o padrão de que superfícies mais suaves inibem a adesão bacteriana ao limitar os pontos de interação física significativos.

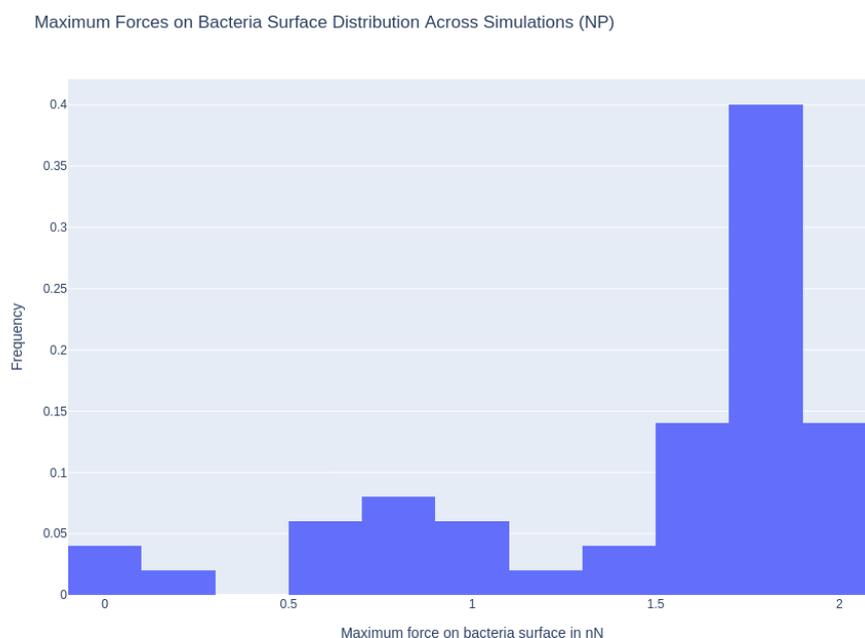


Figura 38 – Distribuição das forças locais máximas para as 200 simulações (em nN), correspondente à superfície *NP*.

Fonte: Da autora

Já a Figura 39 apresenta a distribuição das forças totais de adesão sobre a bactéria ao longo das simulações com a superfície *NP*. Novamente, observa-se um padrão coerente com os resultados obtidos para a superfície *LIPSS*: as forças totais também são inferiores às observadas nas simulações anteriores com superfícies mais rugosas, como a *SPIKE*. Isso indica que a adesão global da bactéria à superfície *NP* é enfraquecida, possivelmente por falta de estruturas topográficas capazes de promover maior acoplamento físico com a bactéria.

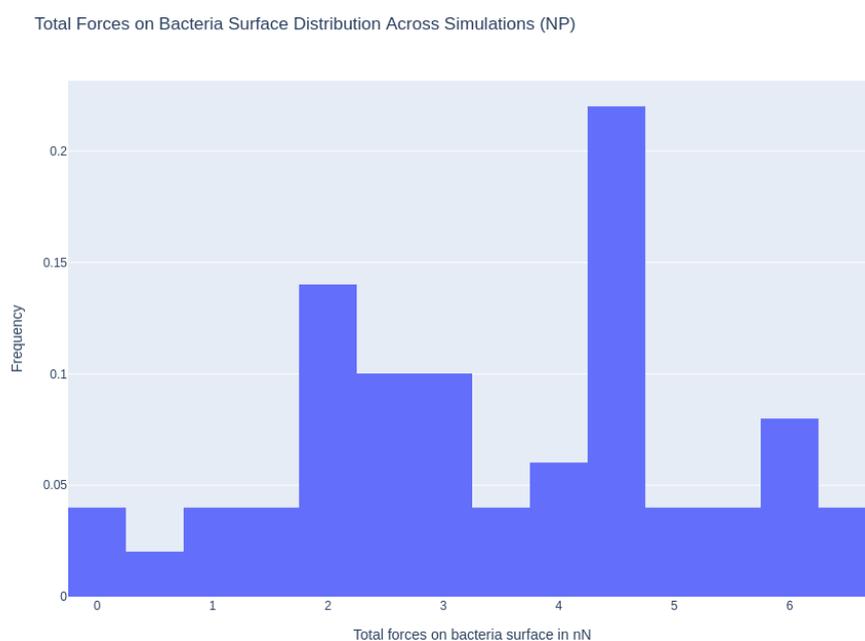


Figura 39 – Distribuição das forças totais de adesão sobre a bactéria nos 200 cenários simulados correspondentes à superfície *NP*.

**Fonte:** Da autora

De maneira geral, o que se observou nas simulações com as superfícies *LIPSS* e *NP* foi que, por apresentarem uma rugosidade consideravelmente menor do que a da superfície *SPIKE* utilizada anteriormente, a bactéria esférica frequentemente não encontrava regiões adequadas na topografia onde pudesse se “ancorar” de forma estável. Como resultado, era comum observar que a bactéria “rolava” sobre a superfície até encontrar um vale (mínimo local), onde havia uma pequena possibilidade de encaixe. Esse comportamento emergente é consistente com observações experimentais reportadas na literatura, como nos estudos de Lazzini et al. (2021) e Lazzini et al. (2017), que demonstram que superfícies com menor rugosidade tendem a inibir a adesão bacteriana justamente por não oferecerem microestruturas suficientes que favoreçam a ancoragem física das células.

Além disso, as forças de adesão geradas nas interações com as superfícies *LIPSS* e *NP*

foram, em média, inferiores às aquelas observadas nas simulações com a superfície *SPIKE*. Esse resultado corrobora a hipótese de que superfícies mais lisas ou com microestruturas menos pronunciadas não fornecem pontos de contato robustos para que a bactéria se fixe de forma eficiente à superfície, tornando o processo de adesão menos eficaz.

É importante destacar que a geometria da rugosidade da superfície desempenha um papel crucial no processo de adesão bacteriana e deve ser cuidadosamente considerada, especialmente quando comparada às dimensões da bactéria alvo. Conforme discutido por Lazzini et al. (2017), a eficácia de uma superfície em prevenir ou promover a adesão bacteriana depende fortemente da correspondência entre os padrões geométricos da rugosidade e o tamanho das bactérias. Certas configurações topográficas podem dificultar ou até impedir o estabelecimento de pontos de ancoragem estáveis, enquanto outras podem favorecer a colonização.

Considerando esses aspectos, a modelagem computacional desenvolvida nesta tese foi concebida de forma a incorporar essa relação geométrica de maneira realista. As superfícies simuladas apresentaram padrões de rugosidade compatíveis com as dimensões da bactéria esférica rígida utilizada nos experimentos. Com isso, foi possível analisar de forma detalhada como diferentes configurações morfológicas influenciam nas interações entre a bactéria e a superfície, com especial ênfase na quantificação das forças de adesão.

Durante o desenvolvimento do modelo, foram apresentados pseudocódigos separados correspondentes a cada uma das fases do processo — a interação entre bactéria e superfície via potencial de Lennard-Jones, o acoplamento entre bactéria e fluido com base na formulação de corpos rígidos, e a interação entre fluido e superfície por meio da formulação WCSPH. A apresentação desses pseudocódigos individuais teve como principal vantagem permitir uma melhor compreensão de cada componente do modelo, facilitando a validação e a reprodutibilidade da abordagem adotada. Além disso, essa estrutura modular contribui para a clareza metodológica, permitindo que cada etapa seja analisada separadamente e adaptada a diferentes contextos de simulação.

A seguir, apresenta-se o pseudocódigo que resume a lógica implementada para o modelo proposto como um todo. Nele, estão descritas as principais etapas para o cálculo das forças de interação entre a bactéria, o fluido e a superfície, evidenciando como o método SPH foi acoplado ao potencial de LJ para representar os fenômenos físicos relevantes ao processo de adesão bacteriana em superfícies rugosas. Essa visão integrada é essencial para entender como as diferentes fases interagem entre si e contribuem de forma sinérgica para os resultados obtidos nas simulações.

## 7.4 PSEUDOCÓDIGO DA INTERAÇÃO BACTÉRIA, FLUIDO E SUPERFÍCIE

---

**Algoritmo 4:** Simulação da interação bactéria, fluido e superfície.

---

**Data:** Partículas (fluido, bactéria, superfície); propriedades físicas ( $m, I, \nu, c_0, \rho_0, h, dx, hdx$ ); parâmetros ( $\phi, C_{max}, \epsilon, \sigma, r_c$ ); tempo final  $T_{final}$ .

**Result:** Evolução das posições, velocidades e rotações da bactéria, do fluido e efeitos de adesão.

```

1 Calcular  $\Delta t \leftarrow \frac{0.125 \cdot dx \cdot hdx}{1.1 \cdot c_0}$ ;
2 while  $t < T_{final}$  do
    // 1. Atualizar densidade e pressão (WCSPH)
3   foreach partícula de fluido  $i$  do
4     | Atualizar  $\rho_i$  e  $p_i$  com base na derivada material e EoS;
    // 2. Calcular acelerações do fluido
5   foreach partícula  $i$  do
6     |  $a_i \leftarrow$  força de pressão + gravidade;
    // 3. Interação fluido-bactéria
7    $F_{fluido}, \tau_{fluido} \leftarrow$  somatório das forças e torques do fluido sobre a bactéria;
    // 4. Adesão bactéria-superfície (Lennard-Jones)
8    $F_{LJ} \leftarrow$  somatório das forças LJ para  $r < r_c$ ;
    // 5. Contato bactéria-superfície
9   Calcular  $F_{contato}, \tau_{contato}$ ;
    // 6. Previsão (RK2)
10  Calcular  $a_0, \alpha_0$  e prever  $v^*, r^*, \omega^*, R^*$ ;
    // 7. Correção (RK2)
11  Recalcular forças, torques e corrigir  $v, r, \omega, R$ ;
    // 8. Correção XSPH
12  foreach fluido  $i$  do
13    |  $v_i \leftarrow v_i + \phi \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_j - v_i) W_{ij}$ ;
    // 9. Atualizar passo de tempo
14   $\Delta t \leftarrow C_{max} \cdot \min \left( \frac{h}{c_0 + |v|}, \frac{h^2}{\nu}, \sqrt{\frac{h}{|a|}} \right)$ ;
15   $t \leftarrow t + \Delta t$ ;

```

---

---

O código-fonte completo da simulação está disponível no repositório: <<https://github.com/RitaJeronimo/tese>>. Esse repositório contém os scripts utilizados nas simulações, além dos arquivos de entrada e instruções para execução.

## 7.5 CONSIDERAÇÕES SOBRE A IMPLEMENTAÇÃO EM GPU

A possibilidade de execução das simulações em Graphics Processing Unit (GPU) foi considerada durante o desenvolvimento do trabalho, dada sua capacidade de acelerar significativamente cálculos paralelizáveis, como os envolvidos no método SPH. No entanto, essa implementação apresentou desafios técnicos relevantes.

O principal entrave esteve relacionado à complexidade do PySPH, framework utilizado neste trabalho, cuja arquitetura depende de diversas bibliotecas externas. Desde as últimas atualizações do código específico para execução em GPU — algumas com mais de oito anos sem manutenção —, diversas dessas bibliotecas sofreram atualizações que afetaram a compatibilidade do sistema. Como consequência, a tarefa de encontrar versões compatíveis entre as bibliotecas e o código legado tornou-se inviável dentro do tempo disponível, especialmente considerando as demais etapas e exigências do trabalho.

Ainda assim, destaca-se que o PySPH continua sendo uma ferramenta ativamente mantida, com atualizações recentes em seu repositório oficial e em seus fóruns de discussão, inclusive com modificações relacionadas à compatibilidade com GPU. Isso demonstra que o projeto não está abandonado e que, em versões futuras, esses problemas de compatibilidade poderão ser resolvidos.

Diante desse cenário, optou-se por realizar todas as simulações utilizando CPU, de forma a garantir estabilidade, reprodutibilidade e consistência nos resultados apresentados nesta pesquisa.

Ressalta-se que a não utilização da GPU não compromete a validade do modelo proposto, uma vez que a formulação matemática, os métodos numéricos empregados e os resultados obtidos permanecem inalterados independentemente da plataforma computacional utilizada.

## 7.6 CONCLUSÃO

Esta tese apresentou o primeiro modelo na literatura baseado no método SPH combinado com o potencial de LJ para simular a adesão bacteriana a superfícies rugosas. Essa abordagem

inovadora aprimora métodos anteriores que integram experimentos com o método MD, como o estudo de Lazzini et al. (2021), permitindo uma representação mais realista das interações entre bactérias rígidas e superfícies rugosas. O modelo desenvolvido estabelece uma base sólida para investigações futuras sobre a adesão bacteriana. Além disso, captura a complexidade das forças intermoleculares ao combinar a formulação WCSPH para a interação entre a superfície e o fluido com o potencial de LJ para representar a interação entre a bactéria rígida e a superfície rugosa. Os principais aspectos que garantem essa captura são:

- **Na interação entre a bactéria e a superfície:** O potencial de LJ modela as forças atrativas e repulsivas entre a bactéria e a superfície, permitindo simular os efeitos da adesão e repulsão conforme a distância entre eles varia. Isso reflete o comportamento físico real das interações intermoleculares, como forças de van der Waals e repulsões estéricas.
- **Na interação entre o fluido e a superfície:** A formulação WCSPH é utilizada para modelar a hidrodinâmica do fluido em torno da superfície rugosa. Além disso, a correção XSPH melhora a estabilidade numérica e evita oscilações indesejadas na simulação.
- **Na interação entre a bactéria e o fluido:** O modelo do corpo rígido acoplado ao fluido baseado em Akinci et al. (2012) permite que a bactéria interaja dinamicamente com o fluido, afetando e sendo afetada pelo campo de velocidades do meio. Isso possibilita efeitos como forças hidrodinâmicas e o torque exercido pelo fluido na bactéria.
- **Na superfície rugosa:** A inclusão da textura na base do tanque no exemplo *sphere in vessel* adiciona um nível de detalhe que influencia diretamente as forças intermoleculares simuladas, alterando pontos de contato e variações locais de adesão.

Os resultados de 200 simulações confirmaram que as forças máximas de atração se concentraram no limite inferior do espectro, em conformidade com estudos anteriores. Além disso, ficou evidente que a rugosidade da superfície influencia diretamente a adesão: áreas de contato maiores favorecem a adesão inicial, distribuindo as forças de maneira uniforme, enquanto áreas menores concentram as forças em pontos específicos, dificultando o processo de adesão. Esses achados reforçam a importância da geometria da superfície no controle da adesão bacteriana e fornecem diretrizes valiosas para o desenvolvimento de superfícies antimicrobianas.

Um dos diferenciais deste trabalho foi a aplicação do modelo a diferentes tipos de superfícies rugosas previamente estudadas experimentalmente: *SPIKE*, *LIPSS* e *NP*. Cada uma dessas

superfícies possui uma topografia característica — com picos agudos (*SPIKE*), sulcos regulares (*LIPSS*) ou nano-pilares (*NP*) — que afetam de maneira distinta a distribuição das forças intermoleculares. As simulações revelaram padrões consistentes com dados obtidos por ShFM, validando o modelo proposto. Por exemplo, nas superfícies *SPIKE*, observou-se uma maior concentração de forças nos picos, dificultando a adesão estável; já nas superfícies *LIPSS*, a distribuição de forças mais homogênea facilitou a adesão inicial em certas regiões regulares. No caso das superfícies *NP*, a adesão foi altamente localizada, reforçando a ideia de que a heterogeneidade topográfica modula a interação entre a bactéria e a superfície. Esses resultados confirmam a sensibilidade do modelo às variações topográficas e sua capacidade de reproduzir tendências observadas experimentalmente, validando-o como uma ferramenta robusta para a predição de adesão bacteriana em diferentes contextos.

O modelo proposto superou limitações de abordagens clássicas, como a termodinâmica, a DLVO e a XDLVO, ao integrar efeitos hidrodinâmicos e interações de curto e longo alcance, além de capturar a rugosidade da superfície com maior realismo. Diferente dos métodos DA e SEI, que assumem simplificações geométricas e distribuições uniformes de força, a abordagem baseada em SPH e no LJ permitiu modelar distribuições heterogêneas de forças intermoleculares, tornando a simulação mais precisa e aplicável a cenários experimentais complexos.

Além disso, a escolha da bactéria *Staphylococcus aureus* como modelo biológico se deve à sua relevância clínica e científica. Sua capacidade de adesão a superfícies, formação de biofilmes e resistência a antibióticos fazem dela um patógeno de grande preocupação hospitalar. Assim, o estudo da adesão de *Staphylococcus aureus* a superfícies rugosas utilizando SPH não apenas contribui para a compreensão dos mecanismos físico-químicos envolvidos, mas também para o avanço de novas estratégias para controle de infecções hospitalares e desenvolvimento de superfícies antibacterianas mais eficazes.

Embora este trabalho represente um avanço significativo, algumas limitações ainda precisam ser superadas. A simplificação da bactéria como um corpo rígido, a ausência de deformabilidade celular e os elevados custos computacionais associados à simulação de superfícies altamente rugosas configuram os principais desafios identificados. No entanto, a escolha de uma bactéria rígida mostrou-se estratégica para possibilitar uma análise detalhada das forças intermoleculares envolvidas na fase inicial da adesão.

A implementação da deformabilidade celular já foi iniciada e constitui uma das principais frentes para trabalhos futuros, pois permitirá uma representação mais fiel da complexidade biológica envolvida. Adicionalmente, a incorporação de características como motilidade bac-

teriana, presença de apêndices celulares, efeitos hidrodinâmicos mais elaborados e outras propriedades relevantes ao processo de adesão contribuirá para aprimorar ainda mais o modelo desenvolvido.

Os resultados obtidos nesta tese também resultaram em publicações científicas em periódicos da área, o que reforça a relevância, a robustez e a aplicabilidade do modelo proposto no avanço das pesquisas sobre adesão bacteriana e desenvolvimento de superfícies antimicrobianas.

Dessa forma, o método SPH combinado com o potencial de LJ se mostrou uma ferramenta pioneira e promissora, estabelecendo um marco inédito na simulação da adesão bacteriana. Ele oferece uma compreensão mais detalhada dos processos iniciais de colonização, contribuindo para o desenvolvimento de superfícies antimicrobianas e estratégias de controle de biofilmes. Os avanços trazidos por este modelo estabelecem uma base sólida para futuras investigações, incentivando a integração entre simulações computacionais e dados experimentais para impulsionar a inovação científica e tecnológica.

## REFERÊNCIAS

- ADEPU, D.; RAMACHANDRAN, P. A corrected transport-velocity formulation for fluid and structural mechanics with sph. *Computational Particle Mechanics*, Springer, v. 11, n. 1, p. 425–445, 2024.
- AHLRICHS, P.; DÜNWEG, B. Lattice-boltzmann simulation of polymer-solvent systems. *International Journal of Modern Physics C*, World Scientific, v. 9, n. 08, p. 1429–1438, 1998.
- AKINCI, N.; CORNELIS, J.; AKINCI, G.; TESCHNER, M. Coupling elastic solids with smoothed particle hydrodynamics fluids. *Computer Animation and Virtual Worlds*, Wiley Online Library, v. 24, n. 3-4, p. 195–203, 2013.
- AKINCI, N.; IHMSEN, M.; AKINCI, G.; SOLENTHALER, B.; TESCHNER, M. Versatile rigid-fluid coupling for incompressible sph. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, ACM New York, NY, USA, v. 31, n. 4, p. 1–8, 2012.
- AL-AMSHAWEE, S.; YUNUS, M. Y. B. M.; LYNAM, J. G.; LEE, W. H.; DAI, F.; DAKHIL, I. H. Roughness and wettability of biofilm carriers: A systematic review. *Environmental Technology & Innovation*, Elsevier, v. 21, p. 101233, 2021.
- ALAM, F.; SHUKLA, V. R.; VARADARAJAN, K.; KUMAR, S. Microarchitected 3d printed polylactic acid (pla) nanocomposite scaffolds for biomedical applications. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, Elsevier, v. 103, p. 103576, 2020.
- ALMAGUER-FLORES, A.; XIMÉNEZ-FYVIE, L.; RODIL, S. Oral bacterial adhesion on amorphous carbon and titanium films: effect of surface roughness and culture media. *Journal of Biomedical Materials Research Part B: Applied Biomaterials: An Official Journal of The Society for Biomaterials, The Japanese Society for Biomaterials, and The Australian Society for Biomaterials and the Korean Society for Biomaterials*, Wiley Online Library, v. 92, n. 1, p. 196–204, 2010.
- AN, Y. H.; FRIEDMAN, R. J. *Handbook of bacterial adhesion: principles, methods, and applications*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2000. v. 204.
- ANNUNZIATA, M.; RIZZO, A.; LEONE, C.; MANGANO, C.; MAZZOLA, N.; NASTRI, L.; PAPAIE, F.; RULLO, F.; GUIDA, L. Bacterial adhesion to direct laser metal formed and mildly acid etched implant surfaces. *Surface and Coatings Technology*, Elsevier, v. 328, p. 390–397, 2017.
- ANTOCI, C.; GALLATI, M.; SIBILLA, S. Numerical simulation of fluid–structure interaction by sph. *Computers & structures*, Elsevier, v. 85, n. 11-14, p. 879–890, 2007.
- ATLURI, S. N.; ZHU, T. A new meshless local petrov-galerkin (mlpg) approach in computational mechanics. *Computational mechanics*, Springer, v. 22, n. 2, p. 117–127, 1998.
- AWAD, T. S.; ASKER, D.; HATTON, B. D. Food-safe modification of stainless steel food-processing surfaces to reduce bacterial biofilms. *ACS applied materials & interfaces*, ACS Publications, v. 10, n. 27, p. 22902–22912, 2018.
- BAGGE-RAVN, D.; GARDSHODN, K.; GRAM, L.; VOGEL, B. F. Comparison of sodium hypochlorite-based foam and peroxyacetic acid-based fog sanitizing procedures in a salmon

- smokehouse: survival of the general microflora and listeria monocytogenes. *Journal of Food Protection*, Elsevier, v. 66, n. 4, p. 592–598, 2003.
- BAGHERI, M.; MOHAMMADI, M.; RIAZI, M. A review of smoothed particle hydrodynamics. *Computational Particle Mechanics*, Springer, p. 1–57, 2023.
- BAILEY, R. G.; TURNER, R. D.; MULLIN, N.; CLARKE, N.; FOSTER, S. J.; HOBBS, J. K. The interplay between cell wall mechanical properties and the cell cycle in staphylococcus aureus. *Biophysical journal*, Elsevier, v. 107, n. 11, p. 2538–2545, 2014.
- BANERJEE, A.; CHOWDHURY, P.; BAURI, K.; SAHA, B.; DE, P. Inhibition and eradication of bacterial biofilm using polymeric materials. *Biomaterials Science*, Royal Society of Chemistry, v. 11, n. 1, p. 11–36, 2023.
- BARRASA-VILLAR, J. I.; AIBAR-REMÓN, C.; PRIETO-ANDRÉS, P.; MARECA-DOÑATE, R.; MOLINER-LAHOZ, J. Impact on morbidity, mortality, and length of stay of hospital-acquired infections by resistant microorganisms. *Clinical Infectious Diseases*, Oxford University Press US, v. 65, n. 4, p. 644–652, 2017.
- BARRERA, N.; GUERRERO, L.; DEBUT, A.; SANTA-CRUZ, P. Printable nanocomposites of polymers and silver nanoparticles for antibacterial devices produced by dod technology. *PLoS One*, Public Library of Science San Francisco, CA USA, v. 13, n. 7, p. e0200918, 2018.
- BAYOUDH, S.; OTHMANE, A.; MORA, L.; OUADA, H. B. Assessing bacterial adhesion using dlvo and xdlvo theories and the jet impingement technique. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, Elsevier, v. 73, n. 1, p. 1–9, 2009.
- BELINHA, J.; DINIS, L.; JORGE, R. N. The natural radial element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Wiley Online Library, v. 93, n. 12, p. 1286–1313, 2013.
- BELYTSCHKO, T.; KRONGAUZ, Y.; ORGAN, D.; FLEMING, M.; KRYSL, P. Meshless methods: an overview and recent developments. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1-4, p. 3–47, 1996.
- BELYTSCHKO, T.; LU, Y. Y.; GU, L. Element-free galerkin methods. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 37, n. 2, p. 229–256, 1994.
- BENZ, W. Smooth particle hydrodynamics: a review. *The numerical modelling of nonlinear stellar pulsations: Problems and prospects*, Springer, p. 269–288, 1990.
- BENZ, W. Smoothed particle hydrodynamics: A review. in numerical modeling of nonlinear stellar pulsation: Problems and prospects. *Kluwer Academic Dordrecht.*, 1990.
- BENZ, W.; ASPHAUG, E. Explicit 3d continuum fracture modeling with smooth particle hydrodynamics. In: *In Lunar and Planetary Inst., Twenty-fourth Lunar and Planetary Science Conference. Part 1: AF p 99-100 (SEE N94-12015 01-91)*. [S.l.: s.n.], 1993. v. 24.
- BENZ, W.; ASPHAUG, E. Impact simulations with fracture. i. method and tests. *Icarus*, Elsevier, v. 107, n. 1, p. 98–116, 1994.
- BENZ, W.; ASPHAUG, E. Simulations of brittle solids using smooth particle hydrodynamics. *Computer physics communications*, Elsevier, v. 87, n. 1-2, p. 253–265, 1995.

- BERCZIK, P. Modeling the star formation in galaxies using the chemo-dynamicsph code. *Astrophysics and Space Science*, Springer, v. 271, p. 103–126, 2000.
- BERCZIK, P.; KOLESNIK, I. Smoothed particle hydrodynamics and its application to astrophysical problems. *Kinematics and Physics of Celestial Bodies*, v. 9, n. 2, p. 1–11, 1993.
- BERCZIK, P.; KOLESNIK, I. Gasodynamical model of the triaxial protogalaxy collapse. *Astronomical and Astrophysical Transactions*, Taylor & Francis, v. 16, n. 3, p. 163–185, 1998.
- BERNE, C.; ELLISON, C. K.; DUCRET, A.; BRUN, Y. V. Bacterial adhesion at the single-cell level. *Nature Reviews Microbiology*, Nature Publishing Group UK London, v. 16, n. 10, p. 616–627, 2018.
- BHATTACHARJEE, S.; ELIMELECH, M. Surface element integration: a novel technique for evaluation of dlvo interaction between a particle and a flat plate. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 193, n. 2, p. 273–285, 1997.
- BHATTACHARJEE, S.; SHARMA, A.; BHATTACHARYA, P. K. Estimation and influence of long range solute. membrane interactions in ultrafiltration. *Industrial & engineering chemistry research*, ACS Publications, v. 35, n. 9, p. 3108–3121, 1996.
- BOHINC, K.; DRAŽIĆ, G.; ABRAM, A.; JEVŠNIK, M.; JERŠEK, B.; NIPIČ, D.; KURINČIČ, M.; RASPOR, P. Metal surface characteristics dictate bacterial adhesion capacity. *International Journal of Adhesion and Adhesives*, Elsevier, v. 68, p. 39–46, 2016.
- BOHINC, K.; DRAŽIĆ, G.; ODER, M.; JEVŠNIK, M.; NIPIČ, D.; GODIČ-TORKAR, K.; RASPOR, P. et al. Available surface dictates microbial adhesion capacity. *International journal of adhesion and adhesives*, Elsevier, v. 50, p. 265–272, 2014.
- BONET, J.; BURTON, A. A simple average nodal pressure tetrahedral element for incompressible and nearly incompressible dynamic explicit applications. *Communications in numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 14, n. 5, p. 437–449, 1998.
- BONET, J.; KULASEGARAM, S. Correction and stabilization of smooth particle hydrodynamics methods with applications in metal forming simulations. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 47, n. 6, p. 1189–1214, 2000.
- BOPP, P. A.; BUHN, J. B.; MAIER, H. A.; HAMPE, M. J. Scope and limits of molecular simulations. *Chemical Engineering Communications*, Taylor & Francis, v. 195, n. 11, p. 1437–1456, 2008.
- BOS, R.; MEI, H. C. Van der; BUSSCHER, H. J. Physico-chemistry of initial microbial adhesive interactions—its mechanisms and methods for study. *FEMS microbiology reviews*, Blackwell Publishing Ltd Oxford, UK, v. 23, n. 2, p. 179–230, 1999.
- BOULBENE, B.; MORCHAIN, J.; BONIN, M. M.; JANEL, S.; LAFONT, F.; SCHMITZ, P. A combined computational fluid dynamics (cfd) and experimental approach to quantify the adhesion force of bacterial cells attached to a plane surface. *AIChE journal*, Wiley Online Library, v. 58, n. 12, p. 3614–3624, 2012.
- BOULBENE, B.; MORCHAIN, J.; SCHMITZ, P. Shear induced detachment of microorganisms attached to a plane wall. 2010.

- BRACKBILL, J. U.; RUPPEL, H. M. Flip: A method for adaptively zoned, particle-in-cell calculations of fluid flows in two dimensions. *Journal of Computational physics*, Elsevier, v. 65, n. 2, p. 314–343, 1986.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.; BURDEN, A. M. *Análise numérica*. [S.l.]: Cengage Learning, 2016.
- BUSSCHER, H.; MEI, H. V. D. Physico-chemical interactions in initial microbial adhesion and relevance for biofilm formation. *Advances in dental research*, SAGE Publications Sage CA: Los Angeles, CA, v. 11, n. 1, p. 24–32, 1997.
- CAI, Q.; YE, X.; WANG, J.; LUO, R. On-the-fly numerical surface integration for finite-difference poisson–boltzmann methods. *Journal of chemical theory and computation*, ACS Publications, v. 7, n. 11, p. 3608–3619, 2011.
- CAO, Z.; MI, L.; MENDIOLA, J.; ELLA-MENYE, J.-R.; ZHANG, L.; XUE, H.; JIANG, S. Reversibly switching the function of a surface between attacking and defending against bacteria. *Angewandte Chemie-International Edition*, v. 51, n. 11, p. 2602, 2012.
- CARRERA, J.; SAALTINK, M. W.; SOLER-SAGARRA, J.; WANG, J.; VALHONDO, C. Reactive transport: a review of basic concepts with emphasis on biochemical processes. *Energies*, MDPI, v. 15, n. 3, p. 925, 2022.
- CENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. *Mecânica dos fluidos-3*. [S.l.]: Amgh Editora, 2015.
- CHEN, J.; BERAUN, J.; CARNEY, T. A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Wiley Online Library, v. 46, n. 2, p. 231–252, 1999.
- CHEN, J.-S.; PAN, C.; ROQUE, C.; WANG, H.-P. A lagrangian reproducing kernel particle method for metal forming analysis. *Computational mechanics*, Springer, v. 22, p. 289–307, 1998.
- CHEN, J.-S.; PAN, C.; WU, C.-T.; LIU, W. K. Reproducing kernel particle methods for large deformation analysis of non-linear structures. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1-4, p. 195–227, 1996.
- CHEN, J.-S.; WU, C.-T.; YOON, S.; YOU, Y. A stabilized conforming nodal integration for galerkin mesh-free methods. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 50, n. 2, p. 435–466, 2001.
- CHENG, W.; DUNN, P.; BRACH, R. Surface roughness effects onmicroparticle adhesion. *The Journal of Adhesion*, Taylor & Francis, v. 78, n. 11, p. 929–965, 2002.
- CHENG, Y.; FENG, G.; MORARU, C. I. Micro-and nanotopography sensitive bacterial attachment mechanisms: a review. *Frontiers in microbiology*, Frontiers Media SA, v. 10, p. 191, 2019.
- CHINNARAJ, S. B.; JAYATHILAKE, P. G.; DAWSON, J.; AMMAR, Y.; PORTOLES, J.; JAKUBOVICS, N.; CHEN, J. Modelling the combined effect of surface roughness and topography on bacterial attachment. *Journal of Materials Science & Technology*, Elsevier, v. 81, p. 151–161, 2021.

- CIMRÁK, I.; GUSENBAUER, M.; JANČIGOVÁ, I. An espresso implementation of elastic objects immersed in a fluid. *Computer Physics Communications*, Elsevier, v. 185, n. 3, p. 900–907, 2014.
- COLAGROSSI, A.; LANDRINI, M. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 191, n. 2, p. 448–475, 2003.
- COSTERTON, J. W. Overview of microbial biofilms. *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology*, Oxford University Press, v. 15, n. 3, p. 137–140, 1995.
- COSTERTON, J. W.; CHENG, K.-J.; GEESEY, G. G.; LADD, T. I.; NICKEL, J. C.; DASGUPTA, M.; MARRIE, T. J. Bacterial biofilms in nature and disease. 1987.
- COSTERTON, J. W.; STEWART, P. S.; GREENBERG, E. P. Bacterial biofilms: a common cause of persistent infections. *science*, American Association for the Advancement of Science, v. 284, n. 5418, p. 1318–1322, 1999.
- COUMANS, E. *Bullet physics library (version 2.78){software}*. 2011.
- CRAWFORD, R. J.; WEBB, H. K.; TRUONG, V. K.; HASAN, J.; IVANOVA, E. P. Surface topographical factors influencing bacterial attachment. *Advances in colloid and interface science*, Elsevier, v. 179, p. 142–149, 2012.
- CUELLO, E. A.; MULKO, L. E.; BARBERO, C. A.; ACEVEDO, D. F.; YSLAS, E. I. Development of micropatterning polyimide films for enhanced antifouling and antibacterial properties. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, Elsevier, v. 188, p. 110801, 2020.
- CUI, X.; LIU, G.; LI, G. A smoothed hermite radial point interpolation method for thin plate analysis. *Archive of Applied Mechanics*, Springer, v. 81, p. 1–18, 2011.
- CUMMINS, S. J.; RUDMAN, M. An sph projection method. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 152, n. 2, p. 584–607, 1999.
- CUNDALL, P. A. A computer model for simulating progressive, large-scale movement in blocky rock system. In: *Proceedings of the international symposium on rock mechanics*. [S.l.: s.n.], 1971. v. 8, p. 129–136.
- DATE, A. W. *Introduction to computational fluid dynamics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2005.
- DENG, Y.; LV, W. *Biofilms and implantable medical devices: infection and control*. [S.l.]: Woodhead Publishing, 2016.
- DERJAGUIN, B. Kolloid z. Kolloid, 1934.
- DERJAGUIN, B. V. Theory of the stability of strongly charged lyophobic sol and of the adhesion of strongly charged particles in solutions of electrolytes. *Acta phys. chim. URSS*, v. 14, p. 633, 1941.
- DINIS, L.; JORGE, R. N.; BELINHA, J. The natural neighbour radial point interpolation method: dynamic applications. *Engineering Computations*, Emerald Group Publishing Limited, v. 26, n. 8, p. 911–949, 2009.

DUN, S. C. van; VERHEUL, M.; PIJLS, B. G.; PREHN, J. van; SCHEPER, H.; GALLI, F.; NIBBERING, P. H.; BOER, M. G. de. Influence of surface characteristics of implant materials on mrsa biofilm formation and effects of antimicrobial treatment. *Frontiers in Microbiology*, Frontiers Media SA, v. 14, p. 1145210, 2023.

DUPUY, L. X.; SILK, W. K. Mechanisms of early microbial establishment on growing root surfaces. *Vadose Zone Journal*, Wiley Online Library, v. 15, n. 2, p. 1–13, 2016.

DURISEN, R. H.; GINGOLD, R. A.; TOHLIN, J. E.; BOSS, A. P. Dynamic fission instabilities in rapidly rotating  $n = 3/2$  polytropes—a comparison of results from finite-difference and smoothed particle hydrodynamics codes. *Astrophysical Journal, Part 1 (ISSN 0004-637X)*, vol. 305, June 1, 1986, p. 281–308., v. 305, p. 281–308, 1986.

DWORKIN, M. Arthur t. henrici, an unsung hero of microbiology—an energetic explorer of many enthusiasms, henrici stuck with microbiology and made diverse and important contributions to the science. *Microbe*, v. 7, n. 11, p. 501, 2012.

ECOLAB. *Imagem ilustrativa sobre formação de biofilme em superfícies industriais*. 2025. <[https://en-br.ecolab.com/-/media/Widen/Food-Beverage/Food-Processing/02STAGE\\_Biofilm-Webpage\\_081120\\_Crop\\_550x310.jpg?h=310&iar=0&w=550&hash=D0A18AF03468A728F947000F110130AB](https://en-br.ecolab.com/-/media/Widen/Food-Beverage/Food-Processing/02STAGE_Biofilm-Webpage_081120_Crop_550x310.jpg?h=310&iar=0&w=550&hash=D0A18AF03468A728F947000F110130AB)>. Acesso em: 24 maio 2025.

ECOLAB. *Imagem ilustrativa sobre maturação de biofilme em ambientes industriais*. 2025. <[https://en-br.ecolab.com/-/media/Widen/Food-Beverage/Food-Processing/03STAGE\\_Biofilm-Webpage\\_081120\\_Crop\\_550x310.jpg?h=310&iar=0&w=550&hash=B90B4997FD778F07958C0036A19D4719](https://en-br.ecolab.com/-/media/Widen/Food-Beverage/Food-Processing/03STAGE_Biofilm-Webpage_081120_Crop_550x310.jpg?h=310&iar=0&w=550&hash=B90B4997FD778F07958C0036A19D4719)>. Acesso em: 24 maio 2025.

ECOLAB. *Imagem sobre biofilme em superfícies*. 2025. <[https://en-br.ecolab.com/-/media/Widen/Food-Beverage/Food-Processing/01STAGE\\_Biofilm-Webpage\\_081120\\_Crop\\_550x310.jpg?h=310&iar=0&w=550&hash=DF3CB35537C90485AFB7A155CEFE58D1](https://en-br.ecolab.com/-/media/Widen/Food-Beverage/Food-Processing/01STAGE_Biofilm-Webpage_081120_Crop_550x310.jpg?h=310&iar=0&w=550&hash=DF3CB35537C90485AFB7A155CEFE58D1)>. Acesso em: 24 maio 2025.

ELBOURNE, A.; CHAPMAN, J.; GELMI, A.; COZZOLINO, D.; CRAWFORD, R. J.; TRUONG, V. K. Bacterial-nanostructure interactions: The role of cell elasticity and adhesion forces. *Journal of Colloid and Interface Science*, Elsevier, v. 546, p. 192–210, 2019.

ELBOURNE, A.; CRAWFORD, R. J.; IVANOVA, E. P. Nano-structured antimicrobial surfaces: From nature to synthetic analogues. *Journal of Colloid and Interface Science*, Elsevier, v. 508, p. 603–616, 2017.

ENCINAS, N.; YANG, C. Y.; GEYER, F.; KALTBEITZEL, A.; BAUMLI, P.; REINHOLZ, J.; MAILANDER, V.; BUTT, H. J.; VOLLMER, D. Submicrometer-sized roughness suppresses bacteria adhesion. *ACS applied materials & interfaces*, ACS Publications, v. 12, n. 19, p. 21192–21200, 2020.

EVRARD, A. E. Beyond n-body-3d cosmological gas dynamics. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (ISSN 0035-8711)*, vol. 235, Dec. 15, 1988, p. 911–934., v. 235, p. 911–934, 1988.

FABBRI, S.; STOODLEY, P. Mechanical properties of biofilms. *The perfect slime—microbial extracellular polymeric substances*, p. 153–178, 2016.

- FABER, J. A.; RASIO, F. A. Post-newtonian sph calculations of binary neutron star coalescence: Method and first results. *Physical Review D*, APS, v. 62, n. 6, p. 064012, 2000.
- FABER, J. A.; RASIO, F. A.; MANOR, J. B. Post-newtonian sph calculations of binary neutron star coalescence. ii. binary mass ratio, equation of state, and spin dependence. *arXiv preprint gr-qc/0006078*, 2000.
- FENG, D.; NEUWEILER, I. A poroelastic  $\delta$ -sph model for modeling biofilm deformation and sloughing in microfluidic channels. *Computers and Geotechnics*, Elsevier, v. 175, p. 106700, 2024.
- FENG, D.; NEUWEILER, I.; LIU, M. Numerical methods for biofilm life cycle modeling at different time scales: from space-time finite element to sph. In: *The 12th International Conference on Computational Methods (ICCM2021)*. [S.l.: s.n.], 2021.
- FENG, D.; NEUWEILER, I.; LIU, M.; NACKENHORST, U. Numerical modeling of the mechanical response of bacterial biofilm to flow by using an sph poroviscoelastic model. *PAMM*, Wiley Online Library, v. 20, n. 1, p. e202000214, 2021.
- FERRARI, A.; DUMBSER, M.; TORO, E. F.; ARMANINI, A. A new 3d parallel sph scheme for free surface flows. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 38, n. 6, p. 1203–1217, 2009.
- FERRARIS, M.; PERERO, S.; FERRARIS, S.; MIOLA, M.; VERNÈ, E.; SKOGLUND, S.; BLOMBERG, E.; WALLINDER, I. O. Antibacterial silver nanocluster/silica composite coatings on stainless steel. *Applied Surface Science*, Elsevier, v. 396, p. 1546–1555, 2017.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. *Computational methods for fluid dynamics*. [S.l.]: Springer, 2002.
- FLINT, S.; BROOKS, J.; BREMER, P. Properties of the stainless steel substrate, influencing the adhesion of thermo-resistant streptococci. *Journal of Food Engineering*, Elsevier, v. 43, n. 4, p. 235–242, 2000.
- FOX, R.; MCDONALD, A. *Introdução à mecânica dos fluidos. [SI]*. [S.l.]: John Wiley Sons Inc, 1998.
- GANESH, K. V.; PATRA, P. K.; TRAVIS, K. P. Multiscale modeling of impact through molecular dynamics and smooth particle hydrodynamics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 593, p. 126903, 2022.
- GAO, J.; HU, Z.; YANG, Q.; LIANG, X.; WU, H. Fluid flow and heat transfer in microchannel heat sinks: Modelling review and recent progress. *Thermal Science and Engineering Progress*, Elsevier, v. 29, p. 101203, 2022.
- GARG, R.; GALVIN, J.; LI, T.; PANNALA, S. Open-source mfix-dem software for gas–solids flows: Part i—verification studies. *Powder Technology*, Elsevier, v. 220, p. 122–137, 2012.
- GAROOSI, F.; SHAKIBAEINIA, A. Numerical simulation of free-surface flow and convection heat transfer using a modified weakly compressible smoothed particle hydrodynamics (wcsph) method. *International Journal of Mechanical Sciences*, Elsevier, v. 188, p. 105940, 2020.
- GARRETT, T. R.; BHAKOO, M.; ZHANG, Z. Bacterial adhesion and biofilms on surfaces. *Progress in natural science*, Elsevier, v. 18, n. 9, p. 1049–1056, 2008.

- GINGER, L. G. The chemistry of the lipids of tubercle bacilli: Lxxi. the determination of terminal methyl groups in branched chain fatty acids. *Journal of Biological Chemistry*, Elsevier, v. 156, n. 2, p. 453–456, 1944.
- GINGOLD, R.; MONAGHAN, J. Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 46, n. 3, p. 429–453, 1982.
- GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Monthly notices of the royal astronomical society*, Oxford University Press Oxford, UK, v. 181, n. 3, p. 375–389, 1977.
- GOMEZ-GESTEIRA, M.; ROGERS, B. D.; DALRYMPLE, R. A.; CRESPO, A. J. State-of-the-art of classical sph for free-surface flows. *Journal of Hydraulic Research*, Taylor & Francis, v. 48, n. sup1, p. 6–27, 2010.
- GRAY, D. A.; WENZEL, M. Multitarget approaches against multiresistant superbugs. *ACS infectious diseases*, ACS Publications, v. 6, n. 6, p. 1346–1365, 2020.
- HABE, A. In status rep. *Super Computing Japan*, ed. T. Nakamura, M. Nagasawa. National Lab. High Energy Phys, 1989.
- HALL-STOODLEY, L.; COSTERTON, J. W.; STOODLEY, P. Bacterial biofilms: from the natural environment to infectious diseases. *Nature reviews microbiology*, Nature Publishing Group UK London, v. 2, n. 2, p. 95–108, 2004.
- HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. Fundamentos de física 2, 4ª edição. Ed. Livros Técnicos e Científicos, São Paulo, 1996.
- HARRIS, C.; ROEKAERTS, D.; ROSENDAL, F.; BUITENDIJK, F.; DASKOPOULOS, P.; VREENEGOOR, A.; WANG, H. Computational fluid dynamics for chemical reactor engineering. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 51, n. 10, p. 1569–1594, 1996.
- HENTSCHKE, R. *Molecular Dynamics and Monte Carlo simulation of Lennard-Jones systems-a tutorial*. [S.I.], 2019.
- HERANT, M.; BENZ, W. Hydrodynamical instabilities and mixing in sn 1987a-two-dimensional simulations of the first 3 months. *Astrophysical Journal, Part 2-Letters (ISSN 0004-637X)*, vol. 370, April 1, 1991, p. L81-L84. *SNSF-supported research.*, v. 370, p. L81–L84, 1991.
- HERMANSSON, M. The dlvo theory in microbial adhesion. *Colloids and surfaces B: Biointerfaces*, Elsevier, v. 14, n. 1-4, p. 105–119, 1999.
- HERNÁNDEZ, V. A. An overview of surface forces and the dlvo theory. *ChemTexts*, Springer, v. 9, n. 4, p. 10, 2023.
- HEYDORN, A.; ERSBØLL, B. K.; HENTZER, M.; PARSEK, M. R.; GIVSKOV, M.; MOLIN, S. Experimental reproducibility in flow-chamber biofilms. *Microbiology*, Microbiology Society, v. 146, n. 10, p. 2409–2415, 2000.
- HIBBELER, R. C. *Fluid mechanics in SI units*. [S.I.]: Pearson Education India, 2017.

- HIKKU, G.; JEYASUBRAMANIAN, K.; JACOBJOSE, J.; THIRURAMANATHAN, P.; VELUSWAMY, P.; IKEDA, H. Alkyd resin based hydrophilic self-cleaning surface with self-refreshing behaviour as single step durable coating. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 531, p. 628–641, 2018.
- HILBERT, L. R.; BAGGE-RAVN, D.; KOLD, J.; GRAM, L. Influence of surface roughness of stainless steel on microbial adhesion and corrosion resistance. *International biodeterioration & biodegradation*, Elsevier, v. 52, n. 3, p. 175–185, 2003.
- HOEK, E. M.; AGARWAL, G. K. Extended dlvo interactions between spherical particles and rough surfaces. *Journal of Colloid and Interface science*, Elsevier, v. 298, n. 1, p. 50–58, 2006.
- HOOGERBRUGGE, P.; KOELMAN, J. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics. *Europhysics letters*, IOP Publishing, v. 19, n. 3, p. 155, 1992.
- HORI, K.; MATSUMOTO, S. Bacterial adhesion: From mechanism to control. *Biochemical Engineering Journal*, Elsevier, v. 48, n. 3, p. 424–434, 2010.
- HOSAIN, M. L.; BEL-FDHILA, R.; KYPRIANIDIS, K. Simulation and validation of flow and heat transfer in an infinite mini-channel using smoothed particle hydrodynamics. *Energy Procedia*, Elsevier, v. 158, p. 5907–5912, 2019.
- HUGHES, G.; WILKINSON, S.; HARKER, J.; GUPTA, I.; HOLDEN, E.; GARVEY, M. Borderline oxacillin-resistant staphylococcus aureus: an emerging threat in the hospital environment. *Journal of Hospital Infection*, Elsevier, 2024.
- HUGHES, J. P.; GRAHAM, D. I. Comparison of incompressible and weakly-compressible sph models for free-surface water flows. *Journal of Hydraulic Research*, Taylor & Francis, v. 48, n. sup1, p. 105–117, 2010.
- IDELSOHN, S. R.; ONATE, E.; CALVO, N.; PIN, F. D. The meshless finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Wiley Online Library, v. 58, n. 6, p. 893–912, 2003.
- ISLAM, M. R. I.; GANESH, K. V.; PATRA, P. K. On the equivalence of eulerian smoothed particle hydrodynamics, total lagrangian smoothed particle hydrodynamics and molecular dynamics simulations for solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 391, p. 114591, 2022.
- ISRAELACHVILI, J. N. *Intermolecular and surface forces*. [S.I.]: Academic press, 2010.
- ISRAELACHVILI, J. N. *Intermolecular and surface forces*. [S.I.]: Academic press, 2011.
- ISSA, R.; LEE, E.; VIOLEAU, D.; LAURENCE, D. Incompressible separated flows simulations with the smoothed particle hydrodynamics gridless method. *International journal for numerical methods in fluids*, Wiley Online Library, v. 47, n. 10-11, p. 1101–1106, 2005.
- JANG, Y.; CHOI, W. T.; JOHNSON, C. T.; GARCIA, A. J.; SINGH, P. M.; BREEDVELD, V.; HESS, D. W.; CHAMPION, J. A. Inhibition of bacterial adhesion on nanotextured stainless steel 316l by electrochemical etching. *ACS Biomaterials Science & Engineering*, ACS Publications, v. 4, n. 1, p. 90–97, 2018.

JOHNSON, G. R.; STRYK, R. A.; BEISSEL, S. R. Sph for high velocity impact computations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1-4, p. 347–373, 1996.

JUN, S. *Reproducing kernel particle method for large deformations*. [S.l.]: Northwestern University, 1996.

KATSIKOIANNI, M.; MISSIRLIS, Y. Concise review of mechanisms of bacterial adhesion to biomaterials and of techniques used in estimating bacteria-material interactions. *Eur Cell Mater*, Citeseer, v. 8, n. 3, p. 37–57, 2004.

KHAN, M. I.; MAZUMDAR, A.; PATHAK, S.; PAUL, P.; BEHERA, S. K.; TAMHANKAR, A. J.; TRIPATHY, S. K.; LUNDBORG, C. S.; MISHRA, A. Biogenic ag/cao nanocomposites kill staphylococcus aureus with reduced toxicity towards mammalian cells. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, Elsevier, v. 189, p. 110846, 2020.

KHATOON, Z.; MCTIERNAN, C. D.; SUURONEN, E. J.; MAH, T.-F.; ALARCON, E. I. Bacterial biofilm formation on implantable devices and approaches to its treatment and prevention. *Heliyon*, Elsevier, v. 4, n. 12, 2018.

KIM, S.; KARRILA, S. J. *Microhydrodynamics: principles and selected applications*. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2013.

KIM, S.-E.; BOYSAN, F. Application of cfd to environmental flows. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, Elsevier, v. 81, n. 1-3, p. 145–158, 1999.

KINCL, O.; PAVELKA, M. Globally time-reversible fluid simulations with smoothed particle hydrodynamics. *Computer Physics Communications*, Elsevier, v. 284, p. 108593, 2023.

KINCL, O.; PESHKOV, I.; PAVELKA, M.; KLIKA, V. Unified description of fluids and solids in smoothed particle hydrodynamics. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 439, p. 127579, 2023.

KOSCHIER, D.; BENDER, J.; SOLENTHALER, B.; TESCHNER, M. A survey on sph methods in computer graphics. In: WILEY ONLINE LIBRARY. *Computer graphics forum*. [S.l.], 2022. v. 41, n. 2, p. 737–760.

KOSHIZUKA, S.; OKA, Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear science and engineering*, Taylor & Francis, v. 123, n. 3, p. 421–434, 1996.

KOWALTOWSKI, T. Von neumann: suas contribuições à computação. *Estudos Avançados*, SciELO Brasil, v. 10, p. 237–260, 1996.

KUMAR, S. S.; HIREMATH, S. S.; RAMACHANDRAN, B.; MUTHUVIJAYAN, V. Effect of surface finish on wettability and bacterial adhesion of micromachined biomaterials. *Biotribology*, Elsevier, v. 18, p. 100095, 2019.

LANCASTER, P.; SALKAUSKAS, K. Surfaces generated by moving least squares methods. *Mathematics of computation*, v. 37, n. 155, p. 141–158, 1981.

LAUGA, E.; POWERS, T. R. The hydrodynamics of swimming microorganisms. *Reports on progress in physics*, IOP Publishing, v. 72, n. 9, p. 096601, 2009.

- LAZZINI, G.; LUTEY, A.; ROMOLI, L.; FUSO, F. Molecular dynamics model for the antibactericity of textured surfaces. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, Elsevier, v. 199, p. 111504, 2021.
- LAZZINI, G.; ROMOLI, L.; BLUNT, L.; GEMINI, L. Design and characterization of textured surfaces for applications in the food industry. *Surface Topography: Metrology and Properties*, IOP Publishing, v. 5, n. 4, p. 044005, 2017.
- LEE, E.-S.; MOULINEC, C.; XU, R.; VIOLEAU, D.; LAURENCE, D.; STANSBY, P. Comparisons of weakly compressible and truly incompressible algorithms for the sph mesh free particle method. *Journal of computational Physics*, Elsevier, v. 227, n. 18, p. 8417–8436, 2008.
- LEE, S. W. *Effects of Surface Topography on Bacterial Biofilm Formation*. Tese (Doutorado) — Syracuse University, 2020.
- LEMON, K.; EARL, A.; VLAMAKIS, H.; AGUILAR, C.; KOLTER, R. Biofilm development with an emphasis on bacillus subtilis. *Bacterial biofilms*, Springer, p. 1–16, 2008.
- LIBERSKY, L. D.; PETSCHKEK, A. G. Smooth particle hydrodynamics with strength of materials. In: SPRINGER BERLIN HEIDELBERG. *Advances in the Free-Lagrange Method Including Contributions on Adaptive Gridding and the Smooth Particle Hydrodynamics Method*. [S.l.], 1991. p. 248–257.
- LIBERSKY, L. D.; PETSCHKEK, A. G.; CARNEY, T. C.; HIPPEL, J. R.; ALLAHDADI, F. A. High strain lagrangian hydrodynamics: a three-dimensional sph code for dynamic material response. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 109, n. 1, p. 67–75, 1993.
- LINKLATER, D. P.; BAULIN, V. A.; JUODKAZIS, S.; CRAWFORD, R. J.; STOODLEY, P.; IVANOVA, E. P. Mechano-bactericidal actions of nanostructured surfaces. *Nature Reviews Microbiology*, Nature Publishing Group UK London, v. 19, n. 1, p. 8–22, 2021.
- LISZKA, T.; ORKISZ, J. The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics. *Computers & Structures*, Elsevier, v. 11, n. 1-2, p. 83–95, 1980.
- LIU, G. A point assembly method for stress analysis for two-dimensional solids. *International journal of solids and structures*, Elsevier, v. 39, n. 1, p. 261–276, 2002.
- LIU, G.; LIU, M. Smoothed particle hydrodynamics: A meshfree particle method. In: . [S.l.: s.n.], 2003.
- LIU, G.-R.; GU, Y. A point interpolation method for two-dimensional solids. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 50, n. 4, p. 937–951, 2001.
- LIU, G.-R.; ZHANG, G.; GU, Y.; WANG, Y. A meshfree radial point interpolation method (rpim) for three-dimensional solids. *Computational Mechanics*, Springer, v. 36, p. 421–430, 2005.
- LIU, L.; ERCAN, B.; SUN, L.; ZIEMER, K. S.; WEBSTER, T. J. Understanding the role of polymer surface nanoscale topography on inhibiting bacteria adhesion and growth. *ACS Biomaterials Science & Engineering*, ACS Publications, v. 2, n. 1, p. 122–130, 2016.

- LIU, M.; LIU, G. Smoothed particle hydrodynamics (sph): an overview and recent developments. *Archives of computational methods in engineering*, Springer, v. 17, p. 25–76, 2010.
- LIU, M.; ZHANG, Z. Smoothed particle hydrodynamics (sph) for modeling fluid-structure interactions. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, Springer, v. 62, p. 1–38, 2019.
- LIU, W. K.; JUN, S.; ZHANG, Y. F. Reproducing kernel particle methods. *International journal for numerical methods in fluids*, Wiley Online Library, v. 20, n. 8-9, p. 1081–1106, 1995.
- LLUCH, È.; CRAENE, M. D.; BIJNENS, B.; SERMESANT, M.; NOAILLY, J.; CAMARA, O.; MORALES, H. G. Breaking the state of the heart: meshless model for cardiac mechanics. *Biomechanics and modeling in mechanobiology*, Springer, v. 18, p. 1549–1561, 2019.
- LO, E. Y.; SHAO, S. Simulation of near-shore solitary wave mechanics by an incompressible sph method. *Applied Ocean Research*, Elsevier, v. 24, n. 5, p. 275–286, 2002.
- LOOSDRECHT, M. C. van; LYKLEMA, J.; NORDE, W.; ZEHNDER, A. Influence of interfaces on microbial activity. *Microbiological reviews*, Am Soc Microbiol, v. 54, n. 1, p. 75–87, 1990.
- LOOSDRECHT, M. v.; LYKLEMA, J.; NORDE, W.; ZEHNDER, A. Influence of interfaces on microbial activity. *Microbiol Rev*, v. 54, n. 1, p. 75–87, 1990.
- LORENZETTI, M.; DOGSA, I.; STOSICKI, T.; STOPAR, D.; KALIN, M.; KOBE, S.; NOVAK, S. The influence of surface modification on bacterial adhesion to titanium-based substrates. *ACS applied materials & interfaces*, ACS Publications, v. 7, n. 3, p. 1644–1651, 2015.
- LORTHOIS, S.; SCHMITZ, P.; ANGLÉS-CANO, E. Experimental study of fibrin/fibrin-specific molecular interactions using a sphere/plane adhesion model. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 241, n. 1, p. 52–62, 2001.
- LU, A.; GAO, Y.; JIN, T.; LUO, X.; ZENG, Q.; SHANG, Z. Effects of surface roughness and texture on the bacterial adhesion on the bearing surface of bio-ceramic joint implants: An in vitro study. *Ceramics International*, Elsevier, v. 46, n. 5, p. 6550–6559, 2020.
- LUAN, Y.; LIU, S.; PIHL, M.; MEI, H. C. van der; LIU, J.; HIZAL, F.; CHOI, C.-H.; CHEN, H.; REN, Y.; BUSSCHER, H. J. Bacterial interactions with nanostructured surfaces. *Current opinion in colloid & interface science*, Elsevier, v. 38, p. 170–189, 2018.
- LUCY, L. B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, vol. 82, Dec. 1977, p. 1013-1024., v. 82, p. 1013–1024, 1977.
- LUO, Q.; CAO, H.; WANG, L.; MA, X.; LIU, X. ZnO@ zns nanorod-array coated titanium: Good to fibroblasts but bad to bacteria. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 579, p. 50–60, 2020.
- LUTEY, A. H.; GEMINI, L.; ROMOLI, L.; LAZZINI, G.; FUSO, F.; FAUCON, M.; KLING, R. Towards laser-textured antibacterial surfaces. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 8, n. 1, p. 10112, 2018.

- LYKLEMA, J. *Fundamentals of interface and colloid science: soft colloids*. [S.l.]: Elsevier, 2005. v. 5.
- MADDI, A.; SCANNAPIECO, F. A. Oral biofilms, oral and periodontal infections, and systemic disease. *Am J Dent*, v. 26, n. 5, p. 249–254, 2013.
- MARSHALL, B. T.; LONG, M.; PIPER, J. W.; YAGO, T.; MCEVER, R. P.; ZHU, C. Direct observation of catch bonds involving cell-adhesion molecules. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 423, n. 6936, p. 190–193, 2003.
- MARSHALL, K.; STOUT, R.; MITCHELL, R. Mechanism of the initial events in the sorption of marine bacteria to surfaces. *Microbiology*, Microbiology Society, v. 68, n. 3, p. 337–348, 1971.
- MEADOWS, P. Attachment of marine-and fresh-water bacteria to solid surfaces. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 207, n. 5001, p. 1108–1108, 1965.
- MEI, L.; BUSSCHER, H. J.; MEI, H. C. van der; REN, Y. Influence of surface roughness on streptococcal adhesion forces to composite resins. *Dental materials*, Elsevier, v. 27, n. 8, p. 770–778, 2011.
- MEIER, C.; FUCHS, S. L.; HART, A. J.; WALL, W. A. A novel smoothed particle hydrodynamics formulation for thermo-capillary phase change problems with focus on metal additive manufacturing melt pool modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 381, p. 113812, 2021.
- MELENK, J. M.; BABUŠKA, I. The partition of unity finite element method: basic theory and applications. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1-4, p. 289–314, 1996.
- MERCIER-BONIN, M.; ADOUE, M.; ZANNA, S.; MARCUS, P.; COMBES, D.; SCHMITZ, P. Evaluation of adhesion force between functionalized microbeads and protein-coated stainless steel using shear-flow-induced detachment. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 338, n. 1, p. 73–81, 2009.
- MERCIER-BONIN, M.; DEHOUCHE, A.; MORCHAIN, J.; SCHMITZ, P. Orientation and detachment dynamics of bacillus spores from stainless steel under controlled shear flow: modelling of the adhesion force. *International journal of food microbiology*, Elsevier, v. 146, n. 2, p. 182–191, 2011.
- MISHRA, B.; RAJAMANI, R. K. The discrete element method for the simulation of ball mills. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 16, n. 11, p. 598–604, 1992.
- MOGHADAM, S. G.; PARSIMEHR, H.; EHSANI, A. Multifunctional superhydrophobic surfaces. *Advances in Colloid and Interface Science*, Elsevier, v. 290, p. 102397, 2021.
- MOHAMADI, F.; FAZELI, A. A review on applications of cfd modeling in covid-19 pandemic. *Archives of Computational Methods in Engineering*, Springer, v. 29, n. 6, p. 3567–3586, 2022.
- MONAGHAN, J. Modelling the universe. *Publications of the Astronomical Society of Australia*, Cambridge University Press, v. 8, n. 3, p. 233–237, 1990.

- MONAGHAN, J. Gravity currents and solitary waves. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Elsevier, v. 98, n. 2-4, p. 523–533, 1996.
- MONAGHAN, J.; KOCHARYAN, A. Sph simulation of multi-phase flow. *Computer Physics Communications*, Elsevier, v. 87, n. 1-2, p. 225–235, 1995.
- MONAGHAN, J. J. Why particle methods work. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, SIAM, v. 3, n. 4, p. 422–433, 1982.
- MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics. In: *Annual review of astronomy and astrophysics. Vol. 30 (A93-25826 09-90)*, p. 543-574., v. 30, p. 543–574, 1992.
- MONAGHAN, J. J. Simulating free surface flows with sph. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 110, n. 2, p. 399–406, 1994.
- MONAGHAN, J. J. Implicit sph drag and dusty gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 138, n. 2, p. 801–820, 1997.
- MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on progress in physics*, IOP Publishing, v. 68, n. 8, p. 1703, 2005.
- MONAGHAN, J. J.; CAS, R. A.; KOS, A.; HALLWORTH, M. Gravity currents descending a ramp in a stratified tank. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 379, p. 39–69, 1999.
- MONAGHAN, J. J.; GINGOLD, R. A. Shock simulation by the particle method sph. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 52, n. 2, p. 374–389, 1983.
- MONAGHAN, J. J.; KOS, A. Solitary waves on a cretan beach. *Journal of waterway, port, coastal, and ocean engineering*, American Society of Civil Engineers, v. 125, n. 3, p. 145–155, 1999.
- MONAGHAN, J. J.; KOS, A. Scott russell's wave generator. *Physics of Fluids*, American Institute of Physics, v. 12, n. 3, p. 622–630, 2000.
- MONAGHAN, J. J.; LATTANZIO, J. C. A simulation of the collapse and fragmentation of cooling molecular clouds. *Astrophysical Journal, Part 1 (ISSN 0004-637X)*, vol. 375, July 1, 1991, p. 177-189. *NASA-supported research.*, v. 375, p. 177–189, 1991.
- MORAES, M. N.; SILVEIRA, W.; TEIXEIRA, L. E. M.; ARAÚJO, I. D. Mechanisms of bacterial adhesion to biomaterials. *Revista Médica de Minas Gerais*, v. 23, n. 1, p. 99–104, 2013.
- MORRIS, J. P.; FOX, P. J.; ZHU, Y. Modeling low reynolds number incompressible flows using sph. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 136, n. 1, p. 214–226, 1997.
- MU, M.; LIU, S.; DEFLORIO, W.; HAO, L.; WANG, X.; SALAZAR, K. S.; TAYLOR, M.; CASTILLO, A.; CISNEROS-ZEVALLOS, L.; OH, J. K. et al. Correlations between bacterial adhesion and surface roughness and topography. In: AICHE. *2023 AIChE Annual Meeting*. [S.I.], 2023.
- MU, M.; LIU, S.; DEFLORIO, W.; HAO, L.; WANG, X.; SALAZAR, K. S.; TAYLOR, M.; CASTILLO, A.; CISNEROS-ZEVALLOS, L.; OH, J. K. et al. Influence of surface roughness, nanostructure, and wetting on bacterial adhesion. *Langmuir*, ACS Publications, v. 39, n. 15, p. 5426–5439, 2023.

- MUNJIZA, A. A. *The combined finite-discrete element method*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004.
- MUNSON, B. R.; YOUNG, D. F.; OKIISHI, T. H. Fundamentals of fluid mechanics. *Oceanographic Literature Review*, v. 10, n. 42, p. 831, 1995.
- NAGASAWA, M.; NAKAMURA, T.; MIYAMA, S. M. Three-dimensional hydrodynamical simulations of type ii supernova-mixing and fragmentation of ejecta. *Astronomical Society of Japan, Publications (ISSN 0004-6264)*, vol. 40, no. 6, 1988, p. 691-708., v. 40, p. 691–708, 1988.
- NANDHINI, P.; KUMAR, P.; MICKYMARAY, S.; ALOTHAIM, A. S.; SOMASUNDARAM, J.; RAJAN, M. Recent developments in methicillin-resistant staphylococcus aureus (mrsa) treatment: a review. *Antibiotics*, MDPI, v. 11, n. 5, p. 606, 2022.
- NAYROLES, B.; TOUZOT, G.; VILLON, P. Generalizing the finite element method: diffuse approximation and diffuse elements. *Computational mechanics*, Springer, v. 10, n. 5, p. 307–318, 1992.
- NEGI, P.; RAMACHANDRAN, P.; HAFTU, A. An improved non-reflecting outlet boundary condition for weakly-compressible sph. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 367, p. 113119, 2020.
- NGUYEN, D. H.; PHAM, V. T.; TRUONG, V. K.; SBARSKI, I.; WANG, J.; BALČYTIS, A.; JUODKAZIS, S.; MAINWARING, D. E.; CRAWFORD, R. J.; IVANOVA, E. P. Role of topological scale in the differential fouling of pseudomonas aeruginosa and staphylococcus aureus bacterial cells on wrinkled gold-coated polystyrene surfaces. *Nanoscale*, Royal Society of Chemistry, v. 10, n. 11, p. 5089–5096, 2018.
- NGUYEN, V. P.; RABCZUK, T.; BORDAS, S.; DUFLOT, M. Meshless methods: a review and computer implementation aspects. *Mathematics and computers in simulation*, Elsevier, v. 79, n. 3, p. 763–813, 2008.
- NIRAULA, P.; HAN, Y.; WANG, J. Comparison of meshfree and mesh-based methods for boundary value problems in physics. In: IOP PUBLISHING. *Journal of Physics: Conference Series*. [S.l.], 2015. v. 640, n. 1, p. 012067.
- ONATE, E.; IDELSOHN, S.; ZIENKIEWICZ, O.; TAYLOR, R.; SACCO, C. A stabilized finite point method for analysis of fluid mechanics problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1-4, p. 315–346, 1996.
- ORTEGA, M. P.; HAGIWARA, T.; WATANABE, H.; SAKIYAMA, T. Adhesion behavior and removability of escherichia coli on stainless steel surface. *Food Control*, Elsevier, v. 21, n. 4, p. 573–578, 2010.
- OSS, C. V. Acid—base interfacial interactions in aqueous media. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Elsevier, v. 78, p. 1–49, 1993.
- PADOVA, D. D.; MOSSA, M. Modelling fluid–structure interactions: A survey of methods and experimental verification. *Proceedings of the Institution of Civil Engineers-Engineering and Computational Mechanics*, Thomas Telford Ltd, v. 173, n. 4, p. 159–172, 2020.

PENG, S.; CHEN, Q.; LIU, E. The role of computational fluid dynamics tools on investigation of pathogen transmission: Prevention and control. *Science of The Total Environment*, Elsevier, v. 746, p. 142090, 2020.

PERNI, S.; PREEDY, E. C.; PROKOPOVICH, P. Success and failure of colloidal approaches in adhesion of microorganisms to surfaces. *Advances in Colloid and Interface Science*, Elsevier, v. 206, p. 265–274, 2014.

PHILLIPS, G.; MONAGHAN, J. A numerical method for three-dimensional simulations of collapsing, isothermal, magnetic gas clouds. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (ISSN 0035-8711)*, vol. 216, Oct. 15, 1985, p. 883-895., v. 216, p. 883–895, 1985.

PICIOREANU, C.; BLAUERT, F.; HORN, H.; WAGNER, M. Determination of mechanical properties of biofilms by modelling the deformation measured using optical coherence tomography. *Water research*, Elsevier, v. 145, p. 588–598, 2018.

PORTAL E-FOOD. *Imagem disponível no Portal E-Food*. 2025. <<https://portalefood.com.br/wp-content/webp-express/webp-images/uploads/2020/07/fig6-1.png.webp>>. Acesso em: 24 maio 2025.

PRICE, D. J. Smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 231, n. 3, p. 759–794, 2012.

RAMACHANDRAN, P.; BHOSALE, A.; PURI, K.; NEGI, P.; MUTA, A.; DINESH, A.; MENON, D.; GOVIND, R.; SANKA, S.; SEBASTIAN, A. S.; SEN, A.; KAUSHIK, R.; KUMAR, A.; KURAPATI, V.; PATIL, M.; TAVKER, D.; PANDEY, P.; KAUSHIK, C.; DUTT, A.; AGARWAL, A. *PySPH Documentation*. 2018. Disponível em: <<https://pysph.readthedocs.io/en/latest/reference/integrator.html#pysph.sph.integrator.EPECIntegrator>>. Acesso em: 10 set. 2024.

RAMACHANDRAN, P.; BHOSALE, A.; PURI, K.; NEGI, P.; MUTA, A.; DINESH, A.; MENON, D.; GOVIND, R.; SANKA, S.; SEBASTIAN, A. S. et al. Pysph: a python-based framework for smoothed particle hydrodynamics. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, ACM New York, NY, v. 47, n. 4, p. 1–38, 2021.

RAMACHANDRAN, P.; PURI, K. Entropically damped artificial compressibility for sph. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 179, p. 579–594, 2019.

RANGLES, P.; LIBERSKY, L. D. Smoothed particle hydrodynamics: some recent improvements and applications. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1-4, p. 375–408, 1996.

RASIO, F. A.; JR, J. C. L. Smoothed particle hydrodynamics calculations of stellar interactions. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 109, n. 1-2, p. 213–230, 1999.

RECOMMED. *Imagem do saneante hospitalar pronto uso para limpeza e desinfecção de superfícies*. 2025. <[https://www.recommended.com.br/smart/modulos/blog/imagens/grande/-saneante-hospitalar-pronto-uso-para-limpeza-e-desinfeccao-de-superficies-qual-a-melhor-versao\\_40-52.jpg](https://www.recommended.com.br/smart/modulos/blog/imagens/grande/-saneante-hospitalar-pronto-uso-para-limpeza-e-desinfeccao-de-superficies-qual-a-melhor-versao_40-52.jpg)>. Acesso em: 24 maio 2025.

- ResearchGate. *Ilustração esquemática de uma função de suavização SPH no caso tridimensional*. 2019. <<https://www.researchgate.net/publication/332880291/figure/fig1/AS:941817663074306@1601558237468/Schematic-illustration-of-a-SPH-smoothing-kernel-function-in-the-three-dimensional-case.png>>. Acesso em: 24 maio 2025.
- REZAVAND, M.; ZHANG, C.; HU, X. A weakly compressible sph method for violent multi-phase flows with high density ratio. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 402, p. 109092, 2020.
- Royal Society of Chemistry. *Imagem do artigo "Understanding the biofilm formation of Staphylococcus aureus on surfaces with different roughness: a multi-scale simulation study"*. 2019. <<https://pubs.rsc.org/image/article/2019/NR/c9nr04375f/c9nr04375f-f1.gif>>. Acesso em: 24 maio 2025.
- RUSSEL, W. B.; RUSSEL, W.; SAVILLE, D. A.; SCHOWALTER, W. R. *Colloidal dispersions*. [S.l.]: Cambridge university press, 1991.
- RUSSELL, M.; SOUTO-IGLESIAS, A.; ZOHDI, T. Numerical simulation of laser fusion additive manufacturing processes using the sph method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 341, p. 163–187, 2018.
- P. A. Santa-Cruz, N. Barrera, L. Guerrero, E. S. Souza e R. S. Queiroz. *Recobrimento Imprimível Híbrido de material bioativo com inibição estrutural de formação de placa bacteriana*. 2019. BR10201901483.
- SCHAECHTER, M. A brief history of bacterial growth physiology. *Frontiers in microbiology*, Frontiers Media SA, v. 6, p. 289, 2015.
- SCOTT, G.; RICHARDSON, P. The application of computational fluid dynamics in the food industry. *Trends in Food Science & Technology*, Elsevier, v. 8, n. 4, p. 119–124, 1997.
- SEDDIKI, O.; HARNAGEA, C.; LEVESQUE, L.; MANTOVANI, D.; ROSEI, F. Evidence of antibacterial activity on titanium surfaces through nanotextures. *Applied Surface Science*, Elsevier, v. 308, p. 275–284, 2014.
- SHADLOO, M. S.; OGER, G.; TOUZÉ, D. L. Smoothed particle hydrodynamics method for fluid flows, towards industrial applications: Motivations, current state, and challenges. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 136, p. 11–34, 2016.
- SHANG, J. Three decades of accomplishments in computational fluid dynamics. *Progress in Aerospace Sciences*, Elsevier, v. 40, n. 3, p. 173–197, 2004.
- SHAO, S.; JI, C.; GRAHAM, D. I.; REEVE, D. E.; JAMES, P. W.; CHADWICK, A. J. Simulation of wave overtopping by an incompressible sph model. *Coastal engineering*, Elsevier, v. 53, n. 9, p. 723–735, 2006.
- SHAO, S.; LO, E. Y. Incompressible sph method for simulating newtonian and non-newtonian flows with a free surface. *Advances in water resources*, Elsevier, v. 26, n. 7, p. 787–800, 2003.
- SHAPIRO, P. R.; MARTEL, H.; VILLUMSEN, J. V.; OWEN, J. M. Adaptive smoothed particle hydrodynamics, with application to cosmology: methodology. *Astrophysical Journal Supplement v. 103, p. 269*, v. 103, p. 269, 1996.

- SHENG, X.; TING, Y. P.; PEHKONEN, S. O. Force measurements of bacterial adhesion on metals using a cell probe atomic force microscope. *Journal of Colloid and Interface Science*, Elsevier, v. 310, n. 2, p. 661–669, 2007.
- SHUI, L.; EIJKEL, J. C.; BERG, A. van den. Multiphase flow in micro-and nanochannels. *Sensors and Actuators B: Chemical*, Elsevier, v. 121, n. 1, p. 263–276, 2007.
- SIEGISMUND, D.; UNDISZ, A.; GERMERODT, S.; SCHUSTER, S.; RETTENMAYR, M. Quantification of the interaction between biomaterial surfaces and bacteria by 3-d modeling. *Acta biomaterialia*, Elsevier, v. 10, n. 1, p. 267–275, 2014.
- SILVA, R. d. C. J. da; DOMINGUES, T. d. A. L.; ROLIM, M. A. P.; DINIZ, S.; MELO, S. de B. Efficient slicing of rational bézier triangles for additive manufacturing. *Additive Manufacturing*, Elsevier, v. 78, p. 103876, 2023.
- SILVA, R. d. C. J. da; MELO, S. d. B.; QUEIROGA, D. d. S.; PAZ, V. M. T. da; DOMINGUES, T. d. A. L. Simulation of bacterial adhesion on a rough surface based on smoothed particle hydrodynamics (sph). *Computational Particle Mechanics*, Springer, p. 1–13, 2025.
- SOLEIMANI, M. *Numerical simulation and experimental validation of biofilm formation*. [S.l.]: Institut für Kontinuumsmechanik, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2017.
- SOLEIMANI, M.; WRIGGERS, P.; RATH, H.; STIESCH, M. Numerical simulation and experimental validation of biofilm in a multi-physics framework using an sph based method. *Computational Mechanics*, Springer, v. 58, p. 619–633, 2016.
- SONDA, K. M. R. et al. Análise sobre o uso de antimicrobianos em pacientes internados por covid-19 em unidade de terapia intensiva: uma revisão da literatura. Florianópolis, SC, 2022.
- SPENGLER, C.; MAIKRANZ, E.; SANTEN, L.; JACOBS, K. Modeling bacterial adhesion to unconditioned abiotic surfaces. *Frontiers in Mechanical Engineering*, Frontiers Media SA, v. 7, p. 661370, 2021.
- SPENGLER, C.; NOLLE, F.; MISCHO, J.; FAIDT, T.; GRANDTHYLL, S.; THEWES, N.; KOCH, M.; MÜLLER, F.; BISCHOFF, M.; KLATT, M. A. et al. Strength of bacterial adhesion on nanostructured surfaces quantified by substrate morphometry. *Nanoscale*, Royal Society of Chemistry, v. 11, n. 42, p. 19713–19722, 2019.
- STAMATOVA, I.; MEURMAN, J. H. Probiotics: health benefits in the mouth. *American Journal of Dentistry*, v. 22, n. 6, p. 329, 2009.
- STELLINGWERF, R.; JR, R. P. Smooth particle magnetohydrodynamics (invited review). *Memorie della Società Astronomia Italiana, Vol. 65*, p. 991, v. 65, p. 991, 1994.
- STOPFORD, P. J. Recent applications of cfd modelling in the power generation and combustion industries. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 26, n. 2, p. 351–374, 2002.
- SU, Z.; LIU, E.; XU, Y.; XIE, P.; SHANG, C.; ZHU, Q. Flow field and noise characteristics of manifold in natural gas transportation station. *Oil & Gas Science and Technology—Revue d'IFP Energies nouvelles*, EDP Sciences, v. 74, p. 70, 2019.

SUCITESA. *Imagem disponível no site SUCITESA*. 2025. <[https://www.sucitesa.com/wp-content/uploads/shutterstock\\_1008433612-1024x683.jpg](https://www.sucitesa.com/wp-content/uploads/shutterstock_1008433612-1024x683.jpg)>. Acesso em: 24 maio 2025.

SUKUMAR, N. Construction of polygonal interpolants: a maximum entropy approach. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 61, n. 12, p. 2159–2181, 2004.

SUKUMAR, N.; MORAN, B.; BELYTSCHKO, T. The natural element method in solid mechanics. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 43, n. 5, p. 839–887, 1998.

SUKUMAR, N.; MORAN, B.; SEMENOV, A. Y.; BELIKOV, V. Natural neighbour galerkin methods. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 50, n. 1, p. 1–27, 2001.

SULSKY, D.; SCHREYER, H. L. Axisymmetric form of the material point method with applications to upsetting and taylor impact problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 139, n. 1-4, p. 409–429, 1996.

SULSKY, D.; ZHOU, S.-J.; SCHREYER, H. L. Application of a particle-in-cell method to solid mechanics. *Computer physics communications*, Elsevier, v. 87, n. 1-2, p. 236–252, 1995.

SWEGLE, J.; ATTAWAY, S. On the feasibility of using smoothed particle hydrodynamics for underwater explosion calculations. *Computational Mechanics*, Springer, v. 17, n. 3, p. 151–168, 1995.

TAFUNI, A.; GIORGI, M. G. D.; ROSIS, A. D. Smoothed particle hydrodynamics vs lattice boltzmann for the solution of steady and unsteady fluid flows. *Computational Particle Mechanics*, Springer, p. 1–23, 2021.

TANDOGAN, N.; ABADIAN, P. N.; HUO, B.; GOLUCH, E. D. Characterization of bacterial adhesion and biofilm formation. *Antimicrobial Coatings and Modifications on Medical Devices*, Springer, p. 67–95, 2017.

TOMA, M.; CHAN-AKELEY, R.; ARIAS, J.; KURGANSKY, G. D.; MAO, W. Fluid–structure interaction analyses of biological systems using smoothed-particle hydrodynamics. *Biology*, MDPI, v. 10, n. 3, p. 185, 2021.

TRUESDAIL, S.; LUKASIK, J.; FARRAH, S.; SHAH, D.; DICKINSON, R. Analysis of bacterial deposition on metal (hydr) oxide-coated sand filter media. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 203, n. 2, p. 369–378, 1998.

TRUONG, V.; WEBB, H.; FADEEVA, E.; CHICHKOV, B.; WU, A.; LAMB, R.; WANG, J.; CRAWFORD, R.; IVANOVA, E. Air-directed attachment of coccoid bacteria to the surface of superhydrophobic lotus-like titanium. *Biofouling*, Taylor & Francis, v. 28, n. 6, p. 539–550, 2012.

TRUONG, V. K.; PHAM, V. T.; MEDVEDEV, A.; LAPOVOK, R.; ESTRIN, Y.; LOWE, T. C.; BAULIN, V.; BOSHKOVIKJ, V.; FLUKE, C. J.; CRAWFORD, R. J. et al. Self-organised nanoarchitecture of titanium surfaces influences the attachment of staphylococcus aureus and pseudomonas aeruginosa bacteria. *Applied microbiology and biotechnology*, Springer, v. 99, p. 6831–6840, 2015.

TUSON, H. H.; WEIBEL, D. B. Bacteria–surface interactions. *Soft matter*, Royal Society of Chemistry, v. 9, n. 17, p. 4368–4380, 2013.

UOL Notícias. *Em um ano de Covid, 2 a cada 3 doentes intubados em UTI morreram no Brasil*. 2021. Figura 1 – UTI para pacientes com coronavírus no hospital Gilberto Novaes, em Manaus (AM). Disponível em: <<https://noticias.uol.com.br/saude/ultimas-noticias/redacao/2021/03/01/em-um-ano-de-covid-2-a-cada-3-doentes-intubados-em-uti-morreram-no-brasil.htm>>.

VARELA-TRINIDAD, G. U.; DOMÍNGUEZ-DÍAZ, C.; SOLÓRZANO-CASTANEDO, K.; ÍÑIGUEZ-GUTIÉRREZ, L.; HERNÁNDEZ-FLORES, T. d. J.; FAFUTIS-MORRIS, M. Probiotics: Protecting our health from the gut. *Microorganisms*, MDPI, v. 10, n. 7, p. 1428, 2022.

VARGAS-ALFREDO, N.; MARTÍNEZ-CAMPOS, E.; SANTOS-COQUILLAT, A.; DORRONSORO, A.; CORTAJARENA, A. L.; CAMPO, A. D.; RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ, J. Fabrication of biocompatible and efficient antimicrobial porous polymer surfaces by the breath figures approach. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 513, p. 820–830, 2018.

VERRAN, J.; BOYD, R. D. The relationship between substratum surface roughness and microbiological and organic soiling: a review. *Biofouling*, Taylor & Francis, v. 17, n. 1, p. 59–71, 2001.

VERWEY, E.; OVERBEEK, J. T. G. Theory of the stability of lyophobic colloids. *Journal of Colloid Science*, Elsevier, v. 10, n. 2, p. 224–225, 1955.

VIOLEAU, D. *Fluid mechanics and the SPH method: theory and applications*. [S.l.]: Oxford University Press, 2012.

VIOLEAU, D.; ISSA, R. Numerical modelling of complex turbulent free-surface flows with the sph method: an overview. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 53, n. 2, p. 277–304, 2007.

VIOLEAU, D.; ROGERS, B. D. Smoothed particle hydrodynamics (sph) for free-surface flows: past, present and future. *Journal of Hydraulic Research*, Taylor & Francis, v. 54, n. 1, p. 1–26, 2016.

VU, B.; CHEN, M.; CRAWFORD, R. J.; IVANOVA, E. P. Bacterial extracellular polysaccharides involved in biofilm formation. *Molecules*, Molecular Diversity Preservation International, v. 14, n. 7, p. 2535–2554, 2009.

WANG, B.; JIN, T.; XU, Q.; LIU, H.; YE, Z.; CHEN, H. Direct loading and tunable release of antibiotics from polyelectrolyte multilayers to reduce bacterial adhesion and biofilm formation. *Bioconjugate chemistry*, ACS Publications, v. 27, n. 5, p. 1305–1313, 2016.

WANG, C.; ZHAO, Y.; ZHENG, S.; XUE, J.; ZHOU, J.; TANG, Y.; JIANG, L.; LI, W. Effect of enamel morphology on nanoscale adhesion forces of streptococcal bacteria: An afm study. *Scanning*, Wiley Online Library, v. 37, n. 5, p. 313–321, 2015.

WANG, X.; RAMÍREZ-HINESTROSA, S.; DOBNIKAR, J.; FRENKEL, D. The lennard-jones potential: when (not) to use it. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Royal Society of Chemistry, v. 22, n. 19, p. 10624–10633, 2020.

WANG, Z.-B.; CHEN, R.; WANG, H.; LIAO, Q.; ZHU, X.; LI, S.-Z. An overview of smoothed particle hydrodynamics for simulating multiphase flow. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 40, n. 23-24, p. 9625–9655, 2016.

WASSMANN, T.; KREIS, S.; BEHR, M.; BUERGERS, R. The influence of surface texture and wettability on initial bacterial adhesion on titanium and zirconium oxide dental implants. *International journal of implant dentistry*, Springer, v. 3, p. 1–11, 2017.

WEIK, F.; WEEBER, R.; SZUTTOR, K.; BREITSPRECHER, K.; GRAAF, J. de; KURON, M.; LANDSGESELL, J.; MENKE, H.; SEAN, D.; HOLM, C. Espresso 4.0—an extensible software package for simulating soft matter systems. *The European Physical Journal Special Topics*, Springer, v. 227, p. 1789–1816, 2019.

WHITE, L. R. On the deryaguin approximation for the interaction of macrobodies. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 95, n. 1, p. 286–288, 1983.

Wikimedia Commons. *Imagem de Staphylococcus aureus resistente à meticilina (MRSA)*. s.d. <<https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/7/7b/MRSA7820.jpg/800px-MRSA7820.jpg>>. Acesso em: 24 maio 2025.

WONG, Y.-C.; GORDON, V. Investigating bacterial deformation upon surface attachment using finite element modeling. In: *APS March Meeting Abstracts*. [S.l.: s.n.], 2021. v. 2021, p. X11–013.

WU, S.; ALTENRIED, S.; ZOGG, A.; ZUBER, F.; MANIURA-WEBER, K.; REN, Q. Role of the surface nanoscale roughness of stainless steel on bacterial adhesion and microcolony formation. *ACS omega*, ACS Publications, v. 3, n. 6, p. 6456–6464, 2018.

WU, S.; ZHANG, B.; LIU, Y.; SUO, X.; LI, H. Influence of surface topography on bacterial adhesion: A review. *Biointerphases*, AIP Publishing, v. 13, n. 6, 2018.

XAVIER, J. B.; FOSTER, K. R. Cooperation and conflict in microbial biofilms. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 104, n. 3, p. 876–881, 2007.

XIE, Y.; CHEN, L.; ZHANG, X.; CHEN, S.; ZHANG, M.; ZHAO, W.; SUN, S.; ZHAO, C. Integrating zwitterionic polymer and ag nanoparticles on polymeric membrane surface to prepare antifouling and bactericidal surface via schiff-based layer-by-layer assembly. *Journal of colloid and interface science*, Elsevier, v. 510, p. 308–317, 2018.

YANG, K.; SHI, J.; WANG, L.; CHEN, Y.; LIANG, C.; YANG, L.; WANG, L.-N. Bacterial anti-adhesion surface design: Surface patterning, roughness and wettability: A review. *Journal of Materials Science & Technology*, Elsevier, v. 99, p. 82–100, 2022.

YI, G.; RIDUAN, S. N.; YUAN, Y.; ZHANG, Y. Microbicide surface nano-structures. *Critical reviews in biotechnology*, Taylor & Francis, v. 39, n. 7, p. 964–979, 2019.

ZAWAWI, M. H.; SALEHA, A.; SALWA, A.; HASSAN, N.; ZAHARI, N. M.; RAMLI, M. Z.; MUDA, Z. C. A review: Fundamentals of computational fluid dynamics (cfd). In: AIP PUBLISHING. *AIP conference proceedings*. [S.l.], 2018. v. 2030, n. 1.

ZAWAWI, M. H.; ZAINAL, N.; SWEE, M.; ZAHARI, N. M.; KAMARUDIN, M.; SHABBIR, M. Efficiency rate of independent floating water treatment device (ifwad). In: AIP PUBLISHING. *AIP Conference Proceedings*. [S.l.], 2017. v. 1885, n. 1.

- ZHANG, A.-m.; SUN, P.-n.; MING, F.-r.; COLAGROSSI, A. Smoothed particle hydrodynamics and its applications in fluid-structure interactions. *Journal of Hydrodynamics, Ser. B*, Elsevier, v. 29, n. 2, p. 187–216, 2017.
- ZHANG, C.; HU, X.; ADAMS, N. A. A weakly compressible sph method based on a low-dissipation riemann solver. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 335, p. 605–620, 2017.
- ZHANG, C.; WANG, J.; REZAVAND, M.; WU, D.; HU, X. An integrative smoothed particle hydrodynamics method for modeling cardiac function. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 381, p. 113847, 2021.
- ZHANG, L.; ADEMILOYE, A.; LIEW, K. Meshfree and particle methods in biomechanics: Prospects and challenges. *Archives of Computational Methods in Engineering*, Springer, v. 26, n. 5, p. 1547–1576, 2019.
- ZHANG, Z.; LIEW, K. M.; CHENG, Y.; LEE, Y. Analyzing 2d fracture problems with the improved element-free galerkin method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Elsevier, v. 32, n. 3, p. 241–250, 2008.
- ZHANG, Z.; LONG, T.; CHANG, J.; LIU, M. A smoothed particle element method (spem) for modeling fluid–structure interaction problems with large fluid deformations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 356, p. 261–293, 2019.
- ZHANG, Z.; ZHAO, P.; LIEW, K. M. Analyzing three-dimensional potential problems with the improved element-free galerkin method. *Computational Mechanics*, Springer, v. 44, p. 273–284, 2009.
- ZHANG, Z.; ZHAO, P.; LIEW, K. M. Improved element-free galerkin method for two-dimensional potential problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Elsevier, v. 33, n. 4, p. 547–554, 2009.
- ZHENG, H.; LIU, L.; MENG, F.; CUI, Y.; LI, Z.; OGUZIE, E. E.; WANG, F. Multifunctional superhydrophobic coatings fabricated from basalt scales on a fluorocarbon coating base. *Journal of Materials Science & Technology*, Elsevier, v. 84, p. 86–96, 2021.
- ZHU, T.; ZHANG, J.-D.; ATLURI, S. A local boundary integral equation (lbie) method in computational mechanics, and a meshless discretization approach. *Computational mechanics*, Springer, v. 21, p. 223–235, 1998.