



PLANO DE TRABALHO

Título do Plano de Trabalho

Magnetohipertermia em regimes de excitação não lineares: uma abordagem computacional por meio de simulação de muitos corpos

Aluno

Matrícula

Assinale os itens da Experiencia Acadêmica do aluno que constam do Lattes

- PET
- Monitoria
- Tutorias
- Projetos de Extensão
- Projeto de Iniciação Científica concluído

1. Adequação do plano de trabalho ao nível de Iniciação Científica e ao projeto de pesquisa do(a) orientador(a)

Este trabalho tem como objetivo estudar a influência dos efeitos das interações dipolares e hidrodinâmicas entre partículas magnéticas na geração de calor em magnetohipertermia, considerando uma suspensão magnética submetida a diferentes excitações não-lineares provenientes da aplicação de um campo magnético externo. A ideia principal consiste em investigar um possível melhoramento do efeito do aquecimento de tumores sujeitos à aplicação desta técnica comparando os resultados de nossas simulações em aplicações de magnetohipertermia para campos linearmente polarizados. Muitos estudos de magnetohipertermia envolvem sistemas mais simples sem considerar interações dipolares entre as partículas e submetidas a um campo magnético linearmente polarizado. Porém, a geração de calor pelas nanopartículas pode ser realizada por meio de campos magnéticos mais complexos, fornecendo uma produção de calor mais intensa que aquelas provenientes de campos linearmente polarizados. Além disso, as partículas podem ser acumuladas em certos locais da região tumoral, no qual as interações dipolares sejam



Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

fundamentais e devem ser levadas em considerações. Portanto esse problema é importante para que a física em questão possa ser compreendida e controlada de modo satisfatório, aumentando a eficiência médica deste método terapêutico, obtendo assim um melhoramento no controle de temperatura na região tumoral. O professor orientador já possui um código próprio capaz de realizar as simulações necessárias para obtenção destes dados, inclusive no contexto de consideração dessas interações hidrodinâmicas, o que revela alto potencial de inovação científica neste trabalho. O trabalho principal do aluno de IC seria a execução de simulações computacionais nessa plataforma, análise dos dados obtidos e eventual implementação de novas sub-rotinas para análise dos resultados das simulações. Nesse sentido, o trabalho proposto ao aluno encontra-se totalmente alinhado com as linhas de pesquisa do orientador, o tema possui relevância científica indiscutível e o nível do trabalho é perfeitamente adequado a um aluno de graduação.

2. Viabilidade de execução (recursos, infraestrutura e metodologia)

Este trabalho será realizado essencialmente a partir de simulações computacionais. Nesse sentido, a infraestrutura necessária para a realização desta pesquisa consiste basicamente em computadores. Os programas utilizados, em sua maioria, são programas de código aberto (Gnuplot, Kile) e/ou disponibilizados a partir de licenças gratuitas aplicáveis a membros da comunidade acadêmica (Intel Fortran Compiler). O sistema operacional utilizado é também gratuito (Linux – Ubuntu). O programa principal (SIMS) utilizado para realização das simulações foi escrito em Fortran pelo Prof. Rafael Gabler Gontijo durante sua Tese de Doutorado. O código fonte desse programa será disponibilizado ao aluno. Além disso, o aluno contará com o auxílio não só de seu orientador como também de outros colaboradores de pesquisa deste. Para esse trabalho em questão, teremos também reuniões periódicas com o Professor Doutor Andrey Guimarães Barbosa da UFMT, um ex-aluno de Doutorado do Professor Rafael pelo Programa de Pós-Graduação em Ciências Mecânicas da UnB com larga experiência no tema. Vale mencionar também que o Prof. Rafael é vinculado ao Grupo Vortex, um dos principais Grupos de Pesquisa do Departamento de Engenharia Mecânica. O Grupo conta com toda a infraestrutura necessária para a realização deste trabalho. Além disso, recentemente o Professor proponente adquiriu com recursos próprios um servidor Linux capaz de rodar as simulações necessárias por meio de acesso remoto usando SSH. A metodologia de pesquisa resumida, vinculada a este plano de trabalho consiste em: estudo bibliográfico, realização de reuniões por videoconferência com o orientador (Google Meets ou Zoom), instalação de programas de computador, treinamento nestes programas a partir de tarefas simples em níveis gradativos de dificuldades, execução de simulações numéricas, confecção de gráficos, implementação de pequenas subrotinas em Fortran no código principal, escrita de textos científicos para documentação dos



Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

resultados de pesquisa em Congressos Internacionais, preferencialmente realizados no Brasil (adequados ao nível de um bom aluno de IC).

3. Bibliografia básica do plano de trabalho

[1] R. E. Rosensweig, 1985, *Ferrohydrodynamics*, Dover Publications Inc., New York (Edição de 1997).

[2] A. B. Guimarães, “*Dinâmica de Langevin Aplicada ao Estudo de Magnetohipertermia em Suspensões Magnéticas*”, Tese de Doutorado, Programa de Pós-graduação em Ciências Mecânicas, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF (2020).

[3] R. G. Gontijo and F. R. Cunha, “*Dynamic numerical simulations of magnetically interacting suspensions in creeping flow*”, *Powder Technol.* 279, 146–165 (2015).

[4] R. G. Gontijo and F. R. Cunha, “*Numerical simulations of magnetic suspensions with hydrodynamic and dipole-dipole magnetic interactions*”, *Phys. Fluids* 29, 062004 (2017).

[5] A. B. Guimarães, F. R. Cunha and R. G. Gontijo, “*The influence of hydrodynamic effects on the complex susceptibility response of magnetic fluids undergoing oscillatory fields: New insights of magnetic hyperthermia*”, *Phys. Fluids* 32, 012008 (2020).

[6] D. V. Berkov, L. Y. Iskakova, A. Y. Zubarev, “*Theoretical study of the magnetization dynamics of nondilute ferrofluids*”, *Physical Review E*, 79, 021407 (2009).

[7] A. J. Cole, V. C. Yang, A. E. David, “*Cancer Theranostics: The Rise of Targeted Magnetic Nanoparticles*”, *Trends Biotechnol.* 29, 323-332 (2011).

[8] A. Y. Zubarev, L. Y. Iskakova, A. F. Abu-Bakr, “*Efect of interparticle interaction on magnetic hyperthermia in ferrofluids*”, *Physica A*, 438, 487-492 (2015).

[9] D. Soto-Aquino and C. Rinaldi, “*Nonlinear energy dissipation of magnetic nanoparticles in oscillating magnetic fields*”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 393, pp. 46-55 (2015).

[10] A. Y. Zubarev, L. Y. Iskakova, A. F. Abu-Bakr, “*Magnetic hyperthermia in solid magnetic colloids*”, *Physica A*, 467, 59-66 (2017).



Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

[11] A. F. Abu-Bakr and A. Y. Zubarev, “*Hyperthermia in a system of interacting ferromagnetic particles under rotating magnetic field*”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 477, 404-407 (2019).

4. Justificativa elaborada pelo(a) orientador(a) acerca das competências e habilidades do aluno para desenvolver as atividades do plano de trabalho.

Qualquer aluno de IC vinculado aos temas de pesquisa do proponente deste plano de trabalho deve possuir facilidade no aprendizado de novas ferramentas computacionais, uma noção razoável de programação científica (no nível de um bom curso de Introdução à Ciência da Computação), ter tido um bom desempenho nas disciplinas básicas de Matemática (Cálculos) e Física (Física 1, 2 e 3) e especial interesse no processo de descoberta científica. Parte desses requisitos são subjetivos. Outra parte será avaliada conforme a execução do próprio trabalho. Mais do que boas notas em disciplinas pontuais (que na opinião deste docente medem muito pouco) espera-se que o aluno tenha grande paixão pelo processo de exploração de um problema multidisciplinar, de fronteira e bastante resiliência no processo de ter que aprender a lidar com seus próprios fracassos e limitações. No fundo, a atividade de Iniciação Científica possui também o objetivo pedagógico de estimular o aluno a superar suas próprias dificuldades através de um trabalho que certamente colocará grandes desafios a serem superados pelo aluno.

5. Cronograma de execução

Além das atividades específicas de cada mês, algumas atividades serão mantidas ao longo de todos os meses de execução desse projeto. Essas são:

1 - Realização de Estudos Dirigidos para treinamento do aluno (fichamentos de artigos, confecção de pequenos programas em Fortran, solução de exercícios vinculados aos temas do projeto); 2 - Realização de reuniões quinzenais entre os membros do Grupo de Pesquisa para discussão do progresso do aluno;

Mês 1 – Estudo bibliográfico dos artigos e livros citados na bibliografia deste plano de trabalho; Instalação dos programas necessários para realização das atividades propostas nos itens subsequentes (Ubuntu, Intel Fortran Compiler, Gnuplot, Kile);

Mês 2 – Estudo bibliográfico dos artigos e livros citados na bibliografia deste plano de trabalho; Realização de simulações computacionais no código SIMS para campos magnéticos com diferentes regimes de excitação considerando



Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

somente interações dipolares, para diferentes intensidades e fração volumétrica de partículas;

Mês 3 – Confecção de gráficos referentes as taxas médias de aumento de temperatura em funções dos parâmetros físicos do problema. Comparação dessas simulações com resultados numéricos e assintóticos obtidos para campos magnéticos linearmente polarizados e campos rotativos;

Mês 4 – Realização de simulações computacionais no código SIMS para campos magnéticos não lineares considerando interações dipolares e hidrodinâmicas entre as partículas magnéticas;

Mês 5 – Confecção de gráficos referentes as taxas médias de aumento de temperatura em funções dos parâmetros físicos do problema; Comparação dessas simulações com resultados numéricos e assintóticos obtidos para campos magnéticos linearmente polarizados e rotativos;

Mês 6 - Confecção de gráficos de curvas de histereses e diagramas de fase referentes aos vários parâmetros físicos do problema. Interpretar fisicamente o comportamento dessas curvas;

Mês 7 – Realização de simulações e confecções de gráficos referentes aos resultados numéricos obtidos; Discussão e interpretação física dos resultados;

Mês 8 - Realização de simulações e confecções de gráficos referentes aos resultados numéricos obtidos; Discussão e interpretação física dos resultados;

Mês 9 - Realização de simulações e confecções de gráficos referentes aos resultados numéricos obtidos; Discussão e interpretação física dos resultados

Mês 10 – Início do processo de organização dos resultados obtidos até essa etapa para fins de documentação destes no formato de um artigo científico para ser submetido a um Congresso Internacional realizado no Brasil (COBEM, ENCIT, CILAMCE, etc.);

Mês 11 – Redação do artigo e do material para apresentação no Congresso do Pibic;

Mês 12 – Apresentação dos resultados obtidos no Congresso de IC da UnB;