



## **PLANO DE TRABALHO**

Título do Plano de Trabalho

**Dispersão hidrodinâmica de partículas magnéticas na ação de campos transientes: aplicações em magnetohipertermia**

### **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 criar e desenvolver uma série de experimentos computacionais, por meio de códigos de programação (Fortran e Python), para que possamos entender melhor a natureza das interações hidrodinâmicas entre partículas magnéticas sujeitas à campos externos transientes. Por meio das simulações propostas pretende-se avaliar a relação existente entre a dispersão hidrodinâmica e o aumento de energia interna provocado por efeitos de histerese de origem magnética. Essa ideia pode se relacionar a um possível melhoramento do efeito do aquecimento de tumores sujeitos à magnetohipertermia (MHT). Além disso, ao compreendermos melhor as tendências dispersivas e agregativas, oriundas do comportamento coletivo de partículas magnéticas sujeitas à interações hidrodinâmicas, esperamos controlar não só a velocidade de aquecimento do tumor, como a homogeneidade deste aquecimento. Nesse sentido, o problema aqui investigado é importante para que a física da MHT na microescala 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, o que revela alto potencial de inovação científica deste plano de trabalho. O trabalho principal do aluno de IC seria a execução de simulações computacionais nessa plataforma, pós-processamento dos dados obtidos (confecção de gráficos e animações), implementação de novas sub-rotinas no código existente e confecção de programas secundários 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)**



## Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

Este trabalho será realizado essencialmente a partir de simulações computacionais. Nesse sentido, a infraestrutura necessária para a realização desta pesquisa consiste basicamente em programas e 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 Yuri Dumaresq Sobral do Departamento de Matemática da UnB. Além disso, 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 presenciais e/ou por videoconferência com o orientador, 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 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] F. R. Cunha, R. G. Gontijo e Y. D. Sobral, “*Symmetry breaking of particle trajectories due to magnetic interactions in a dilute suspension*”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 326, pp. 240-250, (2013);
- [3] 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).
- [4] R. G. Gontijo and F. R. Cunha, “*Dynamic numerical simulations of magnetically interacting suspensions in creeping flow*”, *Powder Technol.* 279, 146–165 (2015).
- [5] R. G. Gontijo and F. R. Cunha, “*Numerical simulations of magnetic suspensions with hydrodynamic and dipole-dipole magnetic interactions*”, *Phys. Fluids* 29, 062004 (2017).



**Universidade de Brasília**

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

- [6] 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).
- [7] D. V. Berkov, L. Y. Iskakova, A. Y. Zubarev, “*Theoretical study of the magnetization dynamics of nondilute ferrofluids*”, Physical Review E, 79, 021407 (2009).
- [8] A. J. Cole, V. C. Yang, A. E. David, “*Cancer Theranostics: The Rise of Targeted Magnetic Nanoparticles*”, Trends Biotechnol, 29, 323-332 (2011).
- [9] 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).
- [10] D. Soto-Aquino and C. Rinaldi, “*Nonlinear energy dissipation of magnetic nanoparticles in oscillating magnetic felds*”, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 393, pp. 46-55 (2015).
- [11] A. Y. Zubarev, L. Y. Iskakova, A. F. Abu-Bakr, “*Magnetic hyperthermia in solid magnetic colloids*”, Physica A, 467, 59-66 (2017).
- [12] 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



**Universidade de Brasília**

**Decanato de Pós-Graduação**

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

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**

**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 frequências de excitação considerando interações dipolares e hidrodinâmicas, para diferentes intensidades e fração volumétrica de partículas;

**Mês 3** – Confecção de gráficos referentes a uma análise cinemática do problema como trajetórias relativas e mapas de dispersão (diagramas de Poincaré), análise das taxas médias de aumento de temperatura em funções dos parâmetros físicos do problema;

**Mês 4** – Desenvolvimento das métricas necessárias para comparação das novas simulações com resultados numéricos anteriores obtidos para o problema simulado pelo docente e publicado na referência [2] deste plano de trabalho;

**Mês 5** – Comparação dos resultados atuais com os resultados da referência [2] e discussão dos resultados obtidos;

**Mês 6** - Definição das próximas varreduras a serem rodadas e análise do progresso feito até este momento;

**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



---

## Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

**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;