



PLANO DE TRABALHO

Título do Plano de Trabalho

Avaliação da condutividade térmica de fluidos magnéticos via 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 investigar como diferentes mecanismos físicos que se manifestam na escala das nanopartículas que compõem um fluido magnético afetam a condutividade térmica deste material. Esse problema é particularmente importante no sentido de fornecer informações científicas confiáveis para que no futuro possamos sintetizar fluidos magnéticos com propriedades controláveis mais interessantes para aplicações de engenharia que envolvam principalmente troca de calor entre superfícies. A comunidade de fluidos magnéticos tem dado pouca atenção ao papel das interações hidrodinâmicas entre as partículas no comportamento de propriedades de transporte desse fluido. 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-



Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

rotinas de tratamento estatístico 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 Engenheiro e Mestre Gabriel Fernandes Dias, um ex-aluno de Mestrado do Professor Rafael pelo Programa de Pós-Graduação da Unicamp com larga experiência em programação científica. Vale mencionar também que este docente é vinculado ao Grupo Vortex, um dos Grupos de Pesquisa do Departamento de Engenharia Mecânica. O Grupo conta com toda a infraestrutura necessária para a realização destes trabalhos. Além disso, o programa principal, responsável pela realização das simulações pode ser rodado em notebooks pessoais dos alunos, não sendo um programa pesado computacionalmente, que demande alta necessidade de poder computacional para viabilização desta pesquisa. 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 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

Campus Universitário Darcy Ribeiro, Edifício CDT - Térreo - AT 10/50, Brasília – DF CEP 70910-900

Telefones: (61) 3107.4180 - 3107.4181 – 3107.4182 – 3107-4183 e-mail: pibicunb@gmail.com <http://www.proic.unb.br/>



Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

Parte da bibliografia básica do plano de trabalho já consta no projeto de pesquisa submetido. Entretanto, acredito ser importante adicionar aqui alguns artigos mais específicos, vinculados a este plano de trabalho. Para fins de facilitar a organização do aluno com relação ao material que este deverá estudar, segue abaixo uma lista contendo a bibliografia básica necessária para a realização dos estudos pretendidos neste plano de trabalho.

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

[2] R. G. Gontijo, 2013, *Micromecânica e Microhidrodinâmica de Suspensões Magnéticas*, Tese de Doutorado, Programa de Pós-graduação em Ciências Mecânicas, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF.

[3] R. Gontijo and F. 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] X. Fang, Y. Xuan and Q. Li, “Anisotropic thermal conductivity of magnetic fluids”, *Progress in Natural Science* 19 (2009) 205–211.

[7] G. Casati, J. Ford, F. Vivaldi, W. M. Visscher, “One-dimensional classical many-body system having a normal thermal conductivity”, *Physical Review Letters*, volume 52, number 21, pp. 1861-1864 (1984).

[8] V.E. Fertman, L.E. Golovicher and N.P. Matusevich, “Thermal conductivity of magnetite magnetic fluids”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 65 (1987), 211-214.

[9] J. Kang and L-W Wang, “First principles Green-Kubo method for thermal conductivity calculations”, *Physical Review B*, 96, 020302(R) (2017).



- [10] M. H. Khadem and A. P. Wemhoff, “Comparison of Green-Kubo and NEMD heat flux formulations for thermal conductivity prediction using the Tersoff potential”, *Computational Materials Science*, 69 (2013), 428-434.
- [11] Q. Li, Y. Xuan and J. Wang, “Experimental investigations on transport properties of magnetic fluids”, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 30 (2005), 109-116.
- [12] W. Lv and A. Henry, “Direct calculation of modal contributions to thermal conductivity via Green-Kubo modal analysis”, *New Journal of Physics*, 18, (2016), 013028.
- [13] P. Pegolo, “Teoria e simulazione numerica della conducibilità termica dell’acqua”, *Corso di Laurea Magistrale in Fisica*, Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, (2017-2018).
- [14] D. P. Sellan, E. S. Landry, J. E. Turney, A. J. H. McGaughey and C. H. Amon, “Size effects in molecular dynamics thermal conductivity predictions”, *Physical Review B*, 81, 214305 (2010).
- [15] S. G. Volz and G. Chen, “Molecular-dynamics simulation of thermal conductivity of silicon crystals”, *Physical Review B*, Volume 61, Number 4, 2651-2656 (2000).
- [16] S. Odenbach, “Magnetic fluids – suspensions of magnetic dipoles and their magnetic control”, *Journal of Physics: Condensed matter*, 15 (2003), S1497-S1508.

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

O aluno de IC vinculado aos temas de pesquisa do proponente deste plano de trabalho deve possuir facilidade no aprendizado de novas ferramentas computacionais, é desejável 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 – Realização de simulações computacionais no código SIMS para reconstrução do comportamento da magnetização de equilíbrio de um fluido magnético para diferentes intensidades de campo aplicado e fração volumétrica de partículas; Comparação dos resultados dessas simulações com teorias assintóticas já consolidadas na literatura;

Mês 3 – Estudo do método de Green-Kubo visando a implementação de uma subrotina de tratamento estatístico no código SIMS para avaliação da condutividade térmica de fluidos magnéticos;

Mês 4 – Estudo de diferentes métodos utilizados na literatura para fins de obtenção da condutividade térmica de materiais a partir de simulações computacionais, como por exemplo o método da dinâmica molecular de não-equilíbrio;

Mês 5 – Implementação de subrotina específica no código SIMS para quantificação da condutividade térmica de fluidos magnéticos via simulação computacional;

Mês 6 - Definição de um protocolo de realização de simulações para definir como iremos isolar os mecanismos físicos (interação campo-partícula, interações dipolares entre as partículas, interações hidrodinâmicas, intensidade do movimento Browniano) a fim de compreendermos como esses afetam a



Universidade de Brasília

Decanato de Pós-Graduação

Programa de Iniciação Científica – ProIC/UnB

resposta da condutividade térmica de um fluido magnético na presença de um campo externo aplicado;

Mês 7 – Realização das simulações na ausência de interações hidrodinâmicas e dipolares, mas considerando já o efeito da interação campo-partícula;

Mês 8 - Realização das simulações na ausência de interações hidrodinâmicas, mas já considerando aqui o efeito das interações dipolares entre as partículas;

Mês 9 - Realização das simulações considerando interações campo-partícula e interações dipolares e hidrodinâmicas entre as partículas;

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;