

DESENVOLVIMENTO DE FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS DE PRÉ E PÓS-PROCESSAMENTO ATRELADOS A SIMULAÇÕES EM AMBIENTE OPENFOAM DE PROCESSOS ASSOCIADOS A MHT

ANDRÉ DE OLIVEIRA BRANDÃO

PROJETO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

FACULDADE DE TECNOLOGIA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA FACULDADE DE TECNOLOGIA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

DESENVOLVIMENTO DE FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS DE PRÉ E PÓS-PROCESSAMENTO ATRELADOS A SIMULAÇÕES EM AMBIENTE OPENFOAM DE PROCESSOS ASSOCIADOS A MHT

ANDRÉ DE OLIVEIRA BRANDÃO

Orientador: PROF. DR. RAFAEL GABLER GONTIJO, ENM/UNB

PROJETO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

PUBLICAÇÃO ENM.PG - XXX/AAAA BRASÍLIA-DF, 09 DE MAIO DE 2024.

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA FACULDADE DE TECNOLOGIA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

DESENVOLVIMENTO DE FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS DE PRÉ E PÓS-PROCESSAMENTO ATRELADOS A SIMULAÇÕES EM AMBIENTE OPENFOAM DE PROCESSOS ASSOCIADOS A MHT

ANDRÉ DE OLIVEIRA BRANDÃO

PROJETO DE GRADUAÇÃO SUBMETIDO AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ME-CÂNICA DA FACULDADE DE TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA, COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE ENGE-NHEIRO MECÂNICO.

APROVADA POR:

Prof. Dr. Rafael Gabler Gontijo, ENM/UnB Orientador

Prof. Dr. Taygoara Felamingo De Oliveira, ENM/UnB Examinador interno

Prof. Dr. José Luiz Alves Da Fontoura Rodrigues, ENM/UnB Examinador interno

BRASÍLIA, 09 DE MAIO DE 2024.

FICHA CATALOGRÁFICA

ANDRÉ DE OLIVEIRA BRANDÃO

Desenvolvimento de ferramentas computacionais de pré e pós-processamento atrelados a simulações em ambiente Openfoam de processos associados a magnetohidrodinâmica 2024xv, 147p., 201x297 mm

(ENM/FT/UnB, Engenheiro Mecânico, Engenharia Mecânica, 2024)

Projeto de Graduação - Universidade de Brasília

Faculdade de Tecnologia - Departamento de Engenharia Mecânica

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

ANDRÉ DE OLIVEIRA BRANDÃO (2024) Desenvolvimento de ferramentas computacionais de pré e pós-processamento atrelados a simulações em ambiente Openfoam de processos associados a magnetohidrodinâmica. Projeto de Graduação em Engenharia Mecânica, Publicação xxx/AAAA, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 147p.

CESSÃO DE DIREITOS

AUTOR: André de Oliveira Brandão

TÍTULO: Desenvolvimento de ferramentas computacionais de pré e pós-processamento atrelados a simulações em ambiente Openfoam de processos associados a magnetohidrodinâmica.

GRAU: Engenheiro Mecânico ANO: 2024

É concedida à Universidade de Brasília permissão para reproduzir cópias deste projeto de graduação e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor se reserva a outros direitos de publicação e nenhuma parte deste projeto de graduação pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Agradecimentos

RESUMO

SUMÁRIO

| R | RESUMO | . II |
|---|---|------|
| 1 | Introdução | . 1 |
| 2 | 2 Objetivos | . 3 |
| | 2.1 Objetivos Gerais | 3 |
| | 2.2 Objetivos Específicos | 3 |
| 3 | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | 4 |
| 4 | FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | . 6 |
| 5 | BASHS DE PRÉ E PÓS-PROCESSAMENTO DAS SIMULAÇÕES | . 7 |
| 6 | 6 VALIDAÇÃO DOS SOLVERS | . 8 |
| 7 | 7 Conclusão | . 9 |
| R | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 10 |
| | 7.1 Apêndice | 12 |

LISTA DE FIGURAS

| 1.1 | Modelo de partículas magneticas com surfactantes em ferrofluido. A colisão | |
|-----|--|---|
| | dessas partículas devido aos surfactantes é elástica [Rosensweig 1985] | 2 |

LISTA DE TABELAS

LISTA DE CÓDIGOS FONTE

Introdução

Uma suspensão magnética caracteriza-se numa mistura sólido-líquido, onde sua fase sólida constitui-se de nanopartículas magnéticas imersas na fase líquida que consiste em um fluido carreador não magnetizável como a água, óleo ou querosene, contendo ainda um material estabilizador não magnetizável (surfactantes) que envolve as partículas magnéticas com o objetivo de evitar a acoplação de duas ou mais dessas partículas, podendo ser de material polimérico ou [Rosensweig 1985] assim como representado na figura 1.1. As suspensões magnéticas podem ser classificadas dependendo do tamanho das nanopartículas magnéticas imersas no fluido carreador. Se estas possuem tamanho na escala dos nanômetros, com o diâmetro dentro do intervalo 8nm < d < 20nm ou 3nm < d < 15nm (FHD), a suspensão é denominada coloidal ou ferrofluido, e as nanopartículas deste tipo de suspensão são sujeitas ao movimento browniano (randômico). Se o tamanho das nanopartículas estão na escala dos micrômetros então a suspensão é denominada não-coloidal e as nanopartículas deste tipo de suspensão estão sujeitas à sedimentação.

Os fluidos magnéticos possuem uma grande versatilidade de uso, como exemplos, para refrigeração de sistemas eletrônicos [Hwang et al. 2022], transporte de drogas até uma região do corpo através do uso de um campo magnético [Huang et al. 2016, Amin et al. 2020, Marie, Plassat e Lesieur 2013], para o processo de separação química magneticamente assistida [Nunez et al. 1995] e no processo de magnetohipertermia

O processo de magnetohipertermia (MHT) consiste no aquecimento de uma região delimitada contendo um ferrofluido sob a influência de um campo magnético alternado, esse aquecimento se dá pela interação entre as partículas magnéticas e o campo magnético aplicado, pois as nanopartículas magnéticas se magnetizarão tentando a todo momento se alinhar ao campo aplicado e a histerese gerada no processo resulta nesse aquecimento localizado.

Aplicado ao tratamento de tumores a magnetohipertermia é útil pois se mantida dentro de intervalos seguros de temperatura pode causar a apoptose das células cancerígenas, causando a retenção do crescimento cancerígeno e segundo [TJ et al. 2021, LE et al. 2001] também pode gerar uma resposta imunológica do organismo. Outro fator de relevância é a

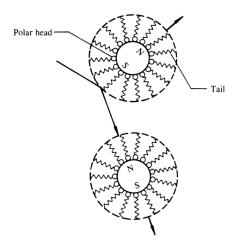


Figura 1.1: Modelo de partículas magneticas com surfactantes em ferrofluido. A colisão dessas partículas devido aos surfactantes é elástica [Rosensweig 1985]

possibilidade de gerar o mínimo de impacto nas células saudáveis circundantes ao tumor com a aplicação desse processo, devido principalmente as diferentes capacidades de dissipação de calor nos tecidos cancerígeno e saudável devido ao fluxo sanguíneo nestes. Atualmente o processo de MHT é aplicado associadamente a outros tratamentos pois a MHT também sensibiliza as células cancerígenas à tratamentos como a radioterapia e a quimioterapia. (DE onde vem isso)

No presente projeto, aborda-se simulações computacionais do processo de MHT, simulado pela plataforma Openfoam, que consiste em um software CFD de código aberto, contendo diversos solvers para simulações de casos que concernem os campos da engenharia, como escoamento de fluidos complexos, escoamentos turbulentos, acústica, transferência de calor, eletromagnetismo, entre outros. Devido à sua versatilidade de uso e capacidade de criar códigos próprios, o Openfoam é utilizado como principal ferramenta computacional para simulação.

É apresentado aqui o código desenvolvido dentro da plataforma Openfoam, além das ferramentas desenvolvidas para uma configuração das condições iniciais dos casos a serem simulados de forma mais intuitiva, assim como o pós-processamento dos resultados, com o objetivo de difundir o código desenvolvido e facilitar o seu uso.

Objetivos

2.1 Objetivos Gerais

Desenvolver ferramentas para preparação de simulações utilizando o ambiente Openfoam relacionadas à Ferrohidrodinâmica (FHD) e ao processo de magnetohipertermia (MHT), e ferramentas de pós processamento dos resultados simulados, juntamente à apresentação de estudos de casos utilizando as ferramentas desenvolvidas.

2.2 Objetivos Específicos

O presente projeto de graduação possui os objetivos de apresentar os seguintes tópicos.

- Equações governantes que regem a FHD e MHT.
- Linhas de pesquisa utilizadas como base para desenvolvimento das ferramentas aqui apresentadas
- BASHs desenvolvidos para pré e pós-processamento das simulações e como utilizá-los
- Validação dos solvers utilizados
- Estudos de caso

Revisão Bibliográfica

Embora já se houvesse pesquisas para seu desenvolvimento, o primeiro ferrofluido estável surgiu na década de 1960 como uma tentativa do pesquisador e engenheiro mecânico Stephen Papell, trabalhando pela NASA, no intuito de desenvolver um método de conduzir o combustível de um foguete, sob gravidade zero, para a câmara de combustão, no caso de missões espaciais onde um foguete precisasse reiniciar seus motores [Arrighi 2021].

E como citado anteriormente, desde então, o ferrofluido vem sendo utilizado para diversas fins, em especial para a bioengenharia, para transporte de medicamentos assistidos por fluido magnético e para a hipertermia magnética.

Esse processo é alvo de estudos acadêmicos no ramo médico datados desde 1941 havendo uma publicação de um artigo no ano de 1957 por [Rk et al. 1957] que tinham o objetivo de identificar e deter a metástase de tumores nos glânglios linfáticos que restaram após cirurgia, pelo aquecimento desses tumores com o uso de finos particulados magnéticos de óxido de ferro Fe_2O_3 (ainda não considerado como suspensão coloidal) sob a aplicação de campos magnéticos alternados. https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/322207/

Embora promissor ainda é necessário melhor entendimento quanto ao processo de MHT, principalmente quanto a ter uma maior acertividade no conhecimento da evolução temporal da temperatura durante o processo, pois as células cancerígenas sofrem o efeito de retenção de seu crescimento a partir de 41° C [D et al. 2015], porém caso seja aplicado uma temperatura acima de 46° C o processo de apoptose dá lugar à necrose, onde pode haver a ruptura da membrana celular tendo o espalhamento do material celular cancerígeno no corpo e ainda pode haver a danificação das células saudáveis e veias circundantes ao tumor. porém também é conhecido que a interação entre os próprios dipolos geram uma contribuição importante para a taxa de geração de calor durante a MHT [Gontijo e Guimarães 2023].

Além do mais a forma na qual o fluido magnético é injetado no tumor, sendo de forma homogênea ou não, pode influenciar no campo de temperatura dentro do tumor, consequentemente influenciando em sua eficácia, devido a isso alguns estudos na literatura, a citar, [Mahesh, Singh e Talukdar 2023, Mahesh, Singh e Talukdar 2023] se preocupam com a taxa

de infusão das nanopartículas magnéticas dentro do tumor, sua difusão e com a distribuição, utilizando um modelo matemático para tal estudo, analisando seus resultados quanto aos campos de temperatura alcançados após a aplicação do processo de MHT.

Fundamentação Teórica

Bashs de pré e pós-processamento das simulações

Validação dos solvers

Conclusão

Referências Bibliográficas

- [Amin et al. 2020]AMIN et al. Magnetic nanoparticles a promising tool for targeted drug delivery system. *Asian Journal of Nanoscience and Materials*, Sami Publishing Company (SPC), v. 3, n. 1, p. 24–37, 2020. ISSN 2645-775X.
- [Arrighi 2021]ARRIGHI, R. S. *NASA*. 2021. Accessed on May 13, 2024. Disponível em: https://www.nasa.gov/history/novel-rocket-fuel-spawned-ferrofluid-industry/.
- [D et al. 2015]D, K. et al. Fever-range hyperthermia vs. hypothermia effect on cancer cell viability, proliferation and HSP90 expression. *PLoS One.*, 2015.
- [Gontijo e Guimarães 2023]GONTIJO, R.; GUIMARãES, A. Effect of interparticle correlation on magnetic hyperthermia in biological media: A numerical study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 580, p. 170931, 2023.
- [Huang et al. 2016]HUANG et al. Magnetic nanoparticle facilitated drug delivery for cancer therapy with targeted and image-guided approaches. *Advanced Functional Materials*, v. 26, n. 22, p. 3818–3836, 2016.
- [Hwang et al. 2022]HWANG et al. Heat flow characteristics of ferrofluid in magnetic field patterns for electric vehicle power electronics cooling. *Symmetry*, v. 14, n. 5, 2022. ISSN 2073-8994.
- [LE et al. 2001]LE, B. et al. Preparation of tumor-specific magnetoliposomes and their application for hyperthermia. *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN*, v. 34, p. 66–72, 2001.
- [Mahesh, Singh e Talukdar 2023]MAHESH, N.; SINGH, N.; TALUKDAR, P. Investigation of a breast cancer magnetic hyperthermia through mathematical modeling of intratumoral nanoparticle distribution and temperature elevations. *Thermal Science and Engineering Progress*, v. 40, p. 101756, 2023.
- [Mahesh, Singh e Talukdar 2023]MAHESH, N.; SINGH, N.; TALUKDAR, P. A mathematical model of intratumoral infusion, particle distribution and heat transfer in cancer tumors: In-silico investigation of magnetic nanoparticle hyperthermia. *International Journal of Thermal Sciences*, v. 183, p. 107887, 2023.

- [Marie, Plassat e Lesieur 2013]MARIE, H.; PLASSAT, V.; LESIEUR, S. Magnetic-fluid-loaded liposomes for mr imaging and therapy of cancer. *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, v. 23, n. 1, p. 25–37, 2013. ISSN 1773-2247.
- [Nunez et al. 1995]NUNEZ, L. et al. Magnetically assisted chemical separation (macs) process: Preparation and optimization of particles for removal of transuranic elements. *Chemical Theonology Division*, 1995.
- [Rk et al. 1957]RK, G. et al. Selective inductive heating of lymph nodes. *Ann Surg.*, p. 596–606, 1957.
- [Rosensweig 1985]ROSENSWEIG, R. E. *Ferrohydrodynamics*. 1nd edition. ed. New York: Dover Publications, 1985.
- [TJ et al. 2021]TJ, C. et al. Potential of Magnetic Hyperthermia to Stimulate Localized Immune Activation. *Small.*, 2021.

7.1 Apêndice