

# **PROJETO DE PESQUISA: PIBIC**

## **Programa de Iniciação científica e Tecnológica CBPF**

Nome do pesquisador: Rodrigo Carlos Viana Coelho

Coordenação: COTEO

Título do projeto: Simulação de fluidos complexos com o método lattice-Boltzmann

Palavra-chave: dinâmica de fluidos, cristais líquidos, método lattice-Boltzmann, matéria ativa.

Área de conhecimento: Física da matéria condensada

Pré-requisito desejado: Saber alguma linguagem de programação, como C ou Python, mas pode-se aprender durante o estágio.

Possibilidade de orientação remota:      ☒ Sim ( ) Não

Resultante principal do Projeto:

- ☒ Publicação (horizonte de 4 anos).
- ☒ Preparação do bolsista para área científica.
- ☒ Produto tecnológico.
- ☐ Produto educacional ou didático.

Rio de Janeiro, 4 de setembro de 2025

## Projeto

O aluno poderá optar por uma das três linhas de pesquisa desenvolvidas pelo orientador: matéria ativa, cristais líquidos ou meios porosos. Um projeto em cada área é listado abaixo como exemplo, mas variações podem ser discutidas.

*Matéria ativa*

### *Sincronização de pilares flexíveis em turbulência ativa*

#### **Resumo**

Este projeto de iniciação científica tem como objetivo estudar, por meio de simulações computacionais, a interação entre obstáculos flexíveis e o escoamento turbulento em nemáticos ativos. O sistema de interesse é modelado pelo formalismo de Beris-Edwards para cristais líquidos, com a dinâmica hidrodinâmica resolvida pelo método lattice-Boltzmann e os sólidos flexíveis descritos pela técnica da fronteira imersa. O aluno trabalhará com um código em C++ já desenvolvido, devendo compreendê-lo e adaptá-lo para a análise de diferentes configurações de obstáculos. As simulações buscarão investigar como a flexibilidade e outras propriedades dos obstáculos influenciam comportamentos coletivos, como sincronização, em regimes de turbulência ativa. O projeto é de caráter teórico e simulacional, mas há possibilidade de colaboração com um grupo experimental da Universidade de Barcelona, responsável pelo desenvolvimento recente da técnica de fabricação dos obstáculos flexíveis. Há perspectiva de resultados originais com potencial para publicação científica.

#### **Introdução**

Os cristais líquidos são materiais muito utilizados em ecrãs devido às suas propriedades óticas. São formados por moléculas anisotrópicas que, numa descrição simplificada, podem ser em forma de disco ou de bastonete e, como resultado, podem formar fases fluidas que dispersam a luz de uma forma que depende da direção. Na fase nemática, estas moléculas alinham-se com as vizinhas formando uma estrutura ordenada à semelhança de um cristal, mas que podem fluir como um líquido; daí vem o nome “cristal líquido”. A física dos cristais líquidos passivos é relativamente bem conhecida e baseia-se em décadas de investigação sobre estes materiais.

A matéria ativa, por outro lado, engloba uma classe de sistemas físicos que é capaz de converter em movimento a energia do ambiente que rodeia as partículas [1]. Por exemplo, uma bactéria consome nutrientes à sua volta de forma a conseguir mover-se. Já uma colónia de bactérias é composta por um grande número destas partículas ativas e corresponde a uma forma de matéria ativa. O comportamento coletivo da colónia normalmente é diferente do de uma bactéria isolada. Como pode ser visto na figura 1a, as bactérias tendem a alinhar-se com os vizinhos devido à sua forma. Este comportamento é muito semelhante ao das moléculas em cristais líquidos na fase nemática e, por isso, estes sistemas são conhecidos como *nemáticos ativos*.

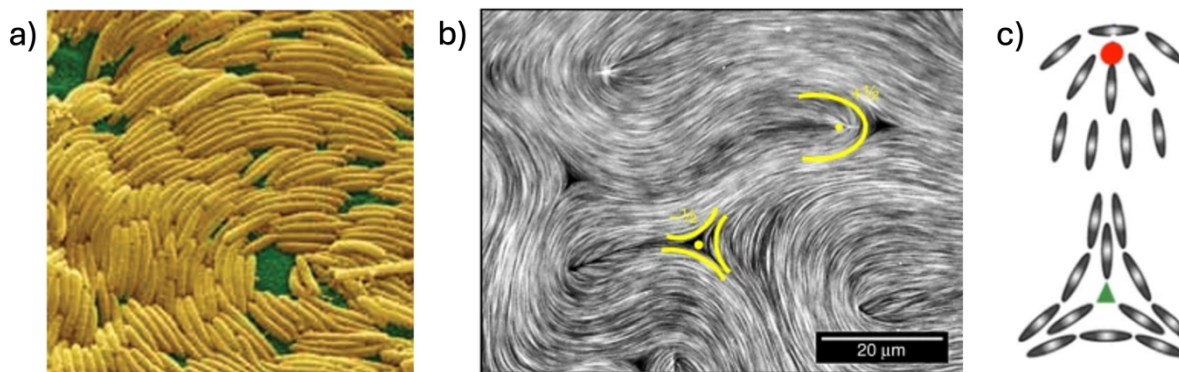


Figura 1: (a) Ordem nemática em colônias de mixobactérias. (b) Escoamento caótico numa mistura de microtúbulos e cinesina. (c) Defeitos topológicos em forma de cometa (positivos) e em forma de trevo (negativos) em nemáticos ativos. Fonte [1]

Outro exemplo de nemático ativo muito estudado consiste numa mistura de microtúbulos e cinesina desenvolvida em laboratório, ver figura 1b [2]. Os microtúbulos são proteínas muito longas e rígidas que sustentam a estrutura das células e também servem de guia para o transporte de organelas apoiadas em moléculas de cinesina, as quais funcionam como micromotores cujo combustível são moléculas de trifosfato de adenosina (ou ATP na sigla em inglês). Quando esta mistura de microtúbulos, cinesina e ATP sedimenta e se acumula numa interface entre óleo e água, a cinesina força os microtúbulos a deslizarem uns contra os outros numa dinâmica caótica que se assemelha à turbulência em fluidos comuns, como ar e água. Este tipo de escoamento é conhecido como turbulência ativa e diferencia-se da turbulência comum por ocorrer na escala de micrómetros e para velocidades de escoamento muito baixas.

Recentemente, um grupo de pesquisadores da Universidade de Barcelona desenvolveu uma técnica experimental que permite criar obstáculos sólidos em misturas de microtúbulos e cinesina. Isso é feito por meio da incidência de luz em uma região de formato arbitrário, o que polimeriza o material. Dessa forma, é possível gerar obstáculos rígidos ou flexíveis, fixados ao substrato (ver figura 2). Esta técnica abre muitas possibilidades para estudos teóricos, como o que é proposto neste projeto.

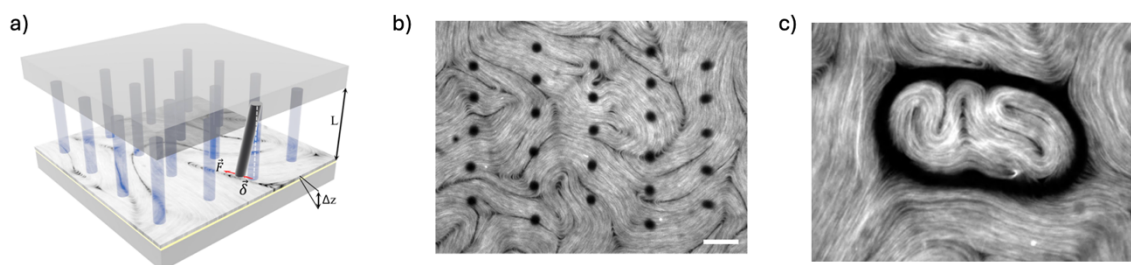


Figura 2: (a) Ilustração dos pilares flexíveis em nemáticos ativos. (b) Imagem do experimento com os pilares flexíveis. (c) Obstáculo flexível em forma de anel.

## **Metodologia**

Um dos modelos matemáticos capazes de descrever a dinâmica dos nemáticos ativos foi desenvolvido por Antony Beris e Brian Edwards no contexto de cristais líquidos passivos. O modelo consiste em duas equações diferenciais acopladas: a equação para a dinâmica da orientação das partículas que compõem o cristal líquido e a equação para a dinâmica do campo de velocidades. Para os nemáticos ativos, adiciona-se ainda à equação das velocidades uma

força suplementar que contabiliza o efeito da atividade deste sistema. Quando estas equações são resolvidas por meio de simulações computacionais, elas fornecem resultados que correspondem ao que é observado nas experiências [4,7].

Utilizaremos o modelo de Beris-Edwards para descrever a dinâmica dos nemáticos ativos. A equação dos diretores do nemático será resolvida pelo método das diferenças finitas, enquanto a equação de Navier-Stokes será solucionada utilizando o método lattice-Boltzmann. Para modelar os pilares flexíveis, empregaremos o método da fronteira imersa (IBM), em que o sólido estará acoplado a uma mola, mantendo seu centro de massa oscilando ao redor de um ponto fixo. O modelo computacional já está implementado em um código C++, que será disponibilizado ao aluno de iniciação científica. O aluno deverá compreender tanto o código quanto o modelo, de modo a ser capaz de modificá-los. Será oferecido treinamento sobre o funcionamento do código e as técnicas necessárias. Além disso, o aluno precisará ter conhecimento ou disposição para aprender a linguagem Python, que será usada na análise dos dados das simulações.

## **Objetivos**

Começaremos validando o modelo com apenas um obstáculo, escolhendo parâmetros que reproduzam os experimentos disponíveis. Em seguida, utilizaremos um grande número de obstáculos flexíveis dispostos em uma rede quadrada e em outras configurações. Variando a constante da mola que mantém cada obstáculo preso ao seu centro de oscilação, analisaremos como os comportamentos coletivos dos obstáculos dependem de sua flexibilidade. Por exemplo, esperamos que, quando a frequência natural de oscilação dos obstáculos for próxima do tempo característico da formação de vórtices no nemático ativo, surjam comportamentos coletivos não triviais, como a sincronização dos movimentos, que podem ajudar a explicar fenômenos naturais ou ser explorados em futuras aplicações de microfluídica.

Considerando que a técnica experimental é recente e o tema desperta grande interesse na comunidade científica, existe uma forte possibilidade de que os resultados deste projeto resultem em um artigo científico de impacto. Dependendo dos avanços obtidos, também há a possibilidade de colaboração com o grupo experimental da Universidade de Barcelona, com o qual o orientador deste projeto já colabora ativamente [7].

## **Referências**

- [1] Marchetti et al., *Rev. Mod. Phys.* **85**, 1143 (2013).
- [2] Mestre. “Colloidal Active Matter: Concepts, Experimental Realizations, and Models”. *CRC Press* (2022).
- [3] Doostmohammadi et. al., *Nat Commun* **9**, 3246 (2018).
- [4] Coelho, Araújo and Telo da Gama, *Soft Matter*, **16**, 4256-4266 (2020).
- [5] Adkins et al., *Science* **377**, 6607, 768-772 (2022).
- [6] Vélez-Cerón, et. al., *PNAS* **121** (11) e2312494121 (2024),
- [7] Vélez-Ceron, Coelho, Guillamat, Telo da Gama, Sagués, Ignés-Mullol. arXiv:2407.09960 (2024).



## *Cristais líquidos*

# *Skymions em cristais líquidos: onde a hidrodinâmica encontra a topologia*

## **Resumo**

Cristais líquidos combinam fluidez de líquidos com propriedades ordenadas de sólidos. Em certas condições, podem formar estruturas chamadas skymions, objetos topológicos estáveis que também aparecem em sistemas magnéticos e têm potencial para aplicações em memória e informação. Este projeto de iniciação científica propõe o estudo computacional da dinâmica de skymions em cristais líquidos colestéricos, explorando como eles interagem com escoamento e gradientes de velocidade. Usaremos simulações numéricas em GPU, baseadas na equação de Navier–Stokes e no modelo de Beris–Edwards, com possibilidade de comparar com dados experimentais de grupos internacionais. O aluno aprenderá programação científica (CUDA e Python), análise de dados e conceitos modernos em matéria condensada. Além disso, terá a chance de interagir com uma rede internacional de pesquisadores, com perspectivas de estágio ou doutorado no exterior.

## **Introdução**

Cristais líquidos são materiais formados por moléculas anisotrópicas e podem se encontrados em diferentes fases como, por exemplo, na fase sólida em que as partículas se alinham numa rede cristalina, na fase isotrópica, em que o material é líquido e as partículas apontam em direções aleatórias, e na fase nemática, em que o material é líquido, mas as partículas estão alinhadas com as vizinhas (Figura 1a). Esta última é especialmente interessante porque o material possui propriedades de líquidos (fluidez) e de redes cristalinas sólidas (orientação preferencial, birefringência). A esta direção preferencial das moléculas, chamamos de campo diretor, que pode mudar no espaço e tempo. Quando as moléculas do cristal líquido são quirais a fase nemática fica colestérica e tem a tendência de espiralar (Figura 1b).

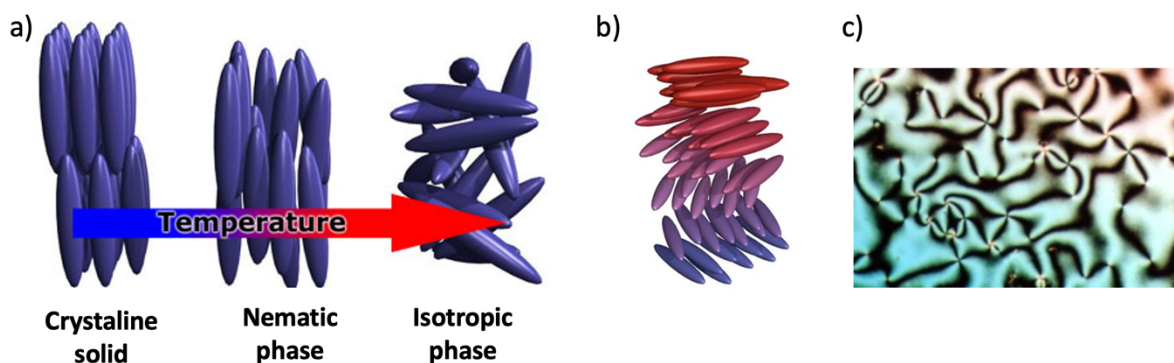


Figura 1. (a) Representação das fases dos cristais líquidos em ordem de temperatura. (b) Representação do arranjo molecular de um cristal líquido colestérico. (c) Textura de um cristal líquido na fase nemática, onde se pode ver os defeitos.

Skymions são configurações topologicamente protegidas que se formam no campo diretor dos cristais líquidos (Figura 2). Para o skymion ser estável, precisamos confinar o cristal líquido colestérico entre duas placas paralelas que tenham uma separação próxima da do comprimento de uma torção do campo diretor. O nome skymion vem do físico Tony Skyrme, que propôs essas estruturas como modelos de partículas no contexto da física nuclear. Skymions também são comuns em sistemas magnéticos como em spins de materiais bidimensionais e, por serem muito estáveis, podem ser futuramente usados em aplicações como em dispositivos de memória. Um efeito já bastante estudado nos skymions em cristais

líquidos é o da aplicação de um campo elétrico externo perpendicular às placas, que faz com que os diretores longe do skyrmion quebrem a simetria para um dos lados e fiquem perpendiculares ao campo. Quando se desliga o campo, o skyrmion volta à sua configuração original, mas numa posição um pouco deslocada da original. Ao usarmos um campo liga-desliga com uma certa frequência, da ordem de 1Hz, o skyrmion se movimenta para um dos lados com uma velocidade efetiva constante.

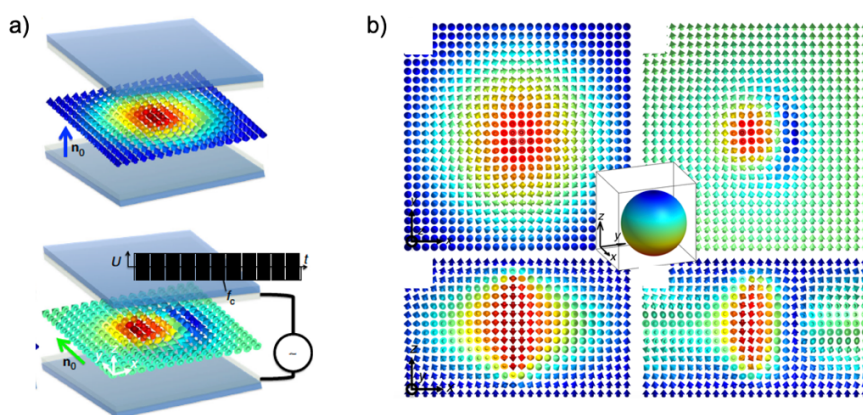


Figura 2. Estrutura de um skyrmion formado entre duas placas paralelas. As cores indicam a componente vertical do campo diretor, que é representado pelas setas. (a) Skyrmion relaxado sem campo elétrico aplicado (em cima) e com campo elétrico perpendicular às placas (em baixo). (b) Planos entre as placas (em cima) e de uma placa a outra (em baixo) para skyrmions sem e com campo.

Um outro efeito que tem sido explorado pelo orientador deste projeto e por seus colaboradores é o da interação dos skyrmions com um campo de velocidades, algo que só é possível num cristal líquido devido à sua fluidez. Por exemplo, ao forçar o cristal líquido a fluir entre as duas placas por meio de um gradiente de pressão, encontramos que o skyrmions se deforma de diferentes maneiras, inclusive se alongando na direção do escoamento, o que foi confirmado experimentalmente (Figura 3a). Além disso, quando umas das placas se move com relação à outra, encontramos um comportamento não trivial: o skyrmion se move numa trajetória inclinada com relação ao movimento da placa, o que também foi confirmado experimentalmente. Este efeito pode ser explicado pela quiralidade do cristal líquidos que quebra a simetria numa das direções e é análogo ao efeito skyrmion-Hall observado em skyrmions magnéticos.

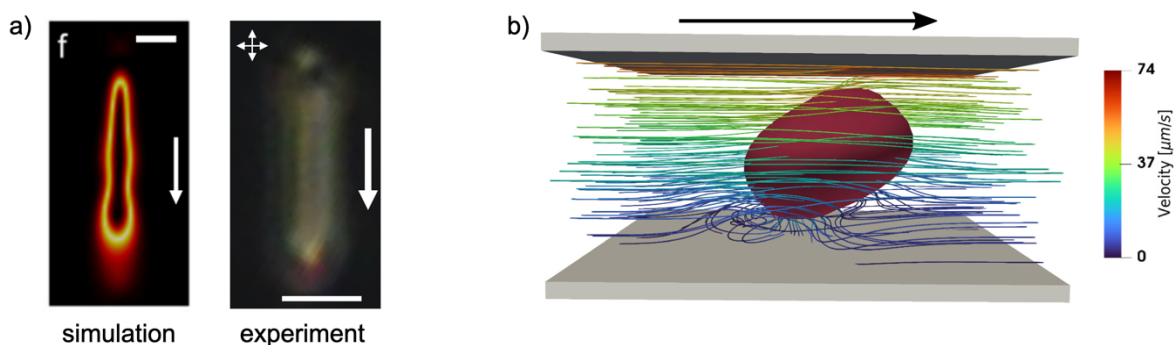


Figura 3. Skyrmions em escoamentos. (a) Escoamento de Poiseuille, em que o fluido é forçado a fluir entre placas paralelas em repouso. As duas imagens correspondem ao campo diretor de uma simulação e à imagem de

microscopia com polarizador e analisador de um experimento. (b) Escoamento de Couette, em que há movimento relativo de uma placa com relação à outra. Imagem de simulação mostrando o contorno do skyrmion e as linhas de corrente do escoamento.

## **Metodologia**

O estudo proposto é principalmente computacional, podendo envolver algum estudo analítico em sistemas simplificados e a análise de dados experimentais. Começaremos por utilizar um código para simulação de cristais líquidos que foi escrito pelo orientador e otimizado por seus alunos. Ele é escrito na linguagem CUDA-C para rodar em GPUs, o que torna as simulações rápidas o suficiente para correrem em poucos dias. Versões anteriores do código para CPU eram cerca de 1000 vezes mais lentas! Portanto proibitivamente longas para simulações em 3D. É desejável que o aluno de iniciação científica aprenda noções de CUDA ao longo do projeto para continuar alterando o código sempre que necessário. Também será necessário saber ou aprender a linguagem Python para analisar os dados das simulações. Para treino, utilizaremos uma pequena GPU e, para as simulações mais longas, usaremos o tempo de GPU que o orientador tem de um projeto.

O modelo computacional é baseado na solução de duas equações acopladas: na equação de Navier-Stokes para resolver o campo de velocidades, o que é feito por meio do método lattice-Boltzmann e na equação de Beris-Edwards, que resolve o campo diretor e usamos o método de diferenças finitas para isso.

## **Objetivos**

Provavelmente o problema específico será definido quando a iniciação começar, pois ele pode ficar ultrapassado ou pode surgir algo mais interessante. Mas, um possível projeto consiste em estudar a trajetória de skyrmions e outras configurações com diferentes cargas topológicas em escoamentos com gradiente de velocidade. Numa publicação anterior [6], ao estudar a passagem de skyrmions ao redor de obstáculos, notamos que as trajetórias seguem uma deflexão não esperada, o que não estudamos com profundidade. Suspeitamos que isso acontece devido ao gradiente de velocidades próximo do obstáculo. *O que acontece em gradientes mais fortes e contínuos como num canal convergente?* Queremos entender como a deflexão na trajetória depende do gradiente de velocidades e se depende da carga topológica. Este efeito poderia ser usado futuramente em protocolos para determinar a carga topológica da configuração.

Para este projeto, o aluno terá a oportunidade de colaborar com pesquisadores de outros países que são referência nesta área. Dependendo do desenvolvimento e dos resultados, estes pesquisadores podem fornecer dados experimentais (EUA e Japão) e auxílio na formulação de teorias analíticas (Inglaterra e Portugal). Esta é também uma oportunidade para o aluno futuramente fazer um estágio ou mesmo um doutorado no exterior com um destes colaboradores que fazem parte de um grupo internacional. Como este ainda é um tópico novo, há uma grande chance de os resultados deste projeto serem publicados num artigo científico.

## **Referências**

- [1] P. J. Ackerman, T. Boyle, I. I. Smalyukh. *Nat Commun* **8**, 673 (2017).
- [2] G. N. C. Amaral, H. Zhao, M. Sedahmed, T. Campante, I. I. Smalyukh, M. Tasinkevych, M. M. Telo da Gama, R. C. V. Coelho. *Scientific Reports* **15**, 2684 (2025)
- [3] R. C. V. Coelho, H. Zhao, M. Tasinkevych, I. I. Smalyukh, M. M. Telo da Gama, *Phys. Rev. Research* **5**, 033210 (2023)

- 
- [4] R. C. V. Coelho, H. Zhao, G. N. C. Amaral, I. I. Smalyukh, M. M. Telo da Gama, M. Tasinkevych. ArXiv: 2405.10850
- [5] G. N. C. Amaral, M. Sedahmed, M. M. Telo da Gama, R. C. V. Coelho. ArXiv:2503.06610
- [6] J. P. A. Santos, M. Sedahmed, R. C. V. Coelho and M. M. Telo da Gama. *Micromachines*, **15**,11, 1302 (2024)
- [7] R. C. V. Coelho, M. Tasinkevych, M. M. Telo da Gama. *J. Phys.: Condens. Matter* **34** 034001 (2021)



*Meios porosos*

## *Transporte de partículas flexíveis em meios porosos*

### **Resumo**

O transporte de partículas flexíveis, como cápsulas e gotas, em meios porosos ocorre em diversos contextos práticos. Exemplos incluem a extração aprimorada de petróleo e exames clínicos de diagnóstico. Neste projeto, usaremos simulações de fluidos baseadas no método lattice-Boltzmann para investigar como as propriedades de partículas flexíveis influenciam seu transporte e comportamento coletivo em meios porosos. Buscaremos comparar nossos resultados de simulação com dados experimentais, fornecidos por colaboradores, a fim de aumentar o impacto e a confiabilidade do estudo.

### **Introdução**

Meios porosos são formados por um conjunto de poros em uma matriz sólida, geralmente interconectados, por onde um fluido pode escoar. Um exemplo muito estudado, devido ao seu interesse econômico, é o das rochas porosas que confinam petróleo no subsolo. Para extrair o óleo contido nessas rochas, injeta-se outro fluido, geralmente água, sob alta pressão (Fig. 1). Essa técnica, embora amplamente utilizada, deixa para trás grande parte do óleo, que permanece retido em poros menores devido ao comportamento complexo da interface entre óleo e água ao atravessar canais irregulares. Estima-se que mais de 70% do óleo permaneça nas rochas. Por isso, diversos grupos têm buscado técnicas capazes de aumentar a fração de óleo extraída.

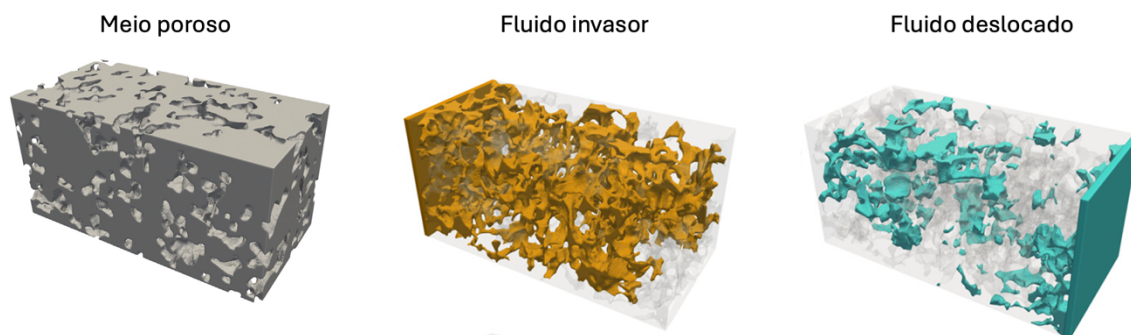


Figura 1. Exemplo de deslocamento de fluido em meio poroso. A figura mostra a matriz sólida do meio poroso, o volume do fluido invasor (amarelo) e o volume do fluido deslocado (azul). Adaptado da Ref. 4.

Uma das estratégias investigadas consiste em injetar partículas flexíveis, como cápsulas, juntamente com a água, de modo que elas obstruam os poros maiores e forcem o escoamento a percorrer poros menores. A modelagem desse problema na escala de poros é bastante complexa, mas técnicas baseadas no método lattice-Boltzmann, desenvolvidas pelo orientador deste projeto, permitem simular cápsulas, emulsões e o escoamento bifásico em meios porosos (Fig. 2).

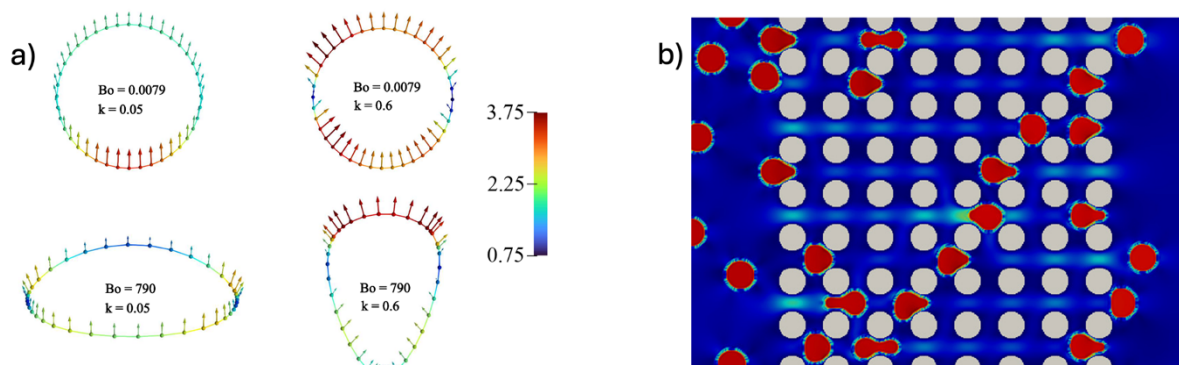


Figura 2. Partículas flexíveis. (a) Formas de cápsulas com diferentes flexibilidades (valores de  $Bo$ , Bond number) e diferentes níveis de confinamento (valores de  $k$ ). (b) Escoamento de gotas imiscíveis por um meio poroso simplificado. Adaptado das Refs. 1 e 5.

## Metodologia

Usaremos o método lattice-Boltzmann para simular o transporte de partículas flexíveis em meios porosos. Inicialmente, trataremos gotas não coalescentes atravessando um conjunto de obstáculos. Para isso, aplicaremos o método de campo de fases para simular dois fluidos imiscíveis (as gotas e o fluido circundante), adicionando uma força repulsiva na interface entre as gotas para evitar a coalescência. O meio poroso será modelado como um conjunto de obstáculos distribuídos aleatoriamente no espaço.

O código inicial, em C++, será fornecido juntamente com um treinamento básico para o aluno. Futuramente, dependendo do andamento do projeto, poderá ser necessária a implementação em CUDA-C para simular sistemas maiores e mais realistas em GPU. Além disso, será possível acoplar a dinâmica das partículas ao deslocamento água-óleo.

## Objetivos

- Treinar o aluno sobre simulação de fluidos e tratamento de dados.
- Estudar como o transporte das partículas depende da sua flexibilidade e do tamanho.
- Entender como as partículas se depositam no meio e como forçar o fluido a passar por poros menores.
- Aprimorar os modelos computacionais para estudar problemas mais realistas.
- Comparar com dados experimentais fornecidos por colaboradores.
- Escrever um artigo com os resultados.

## Referências

- [1] Rodrigo C. V. Coelho, Danilo P. F. Silva, António M. R. Maschio, Margarida M. Telo da Gama, Nuno A. M. Araújo, *Physics of Fluids* **35**, 013304 (2023)
- [2] Danilo P. F. Silva, Rodrigo C. V. Coelho, Margarida M. Telo da Gama, Nuno A. M. Araújo, *Phys. Rev. E* **107**, 035106 (2023)
- [3] Danilo P. F. Silva, Rodrigo C. V. Coelho, Ignacio Pagonabarraga, Sauro Succi, Margarida M. Telo da Gama, Nuno A. M. Araújo. *Soft Matter*, **20**, 2419-2441 (2024)
- [4] Mahmoud Sedahmed, Rodrigo C. V. Coelho, Nuno A. M. Araújo, E. M. Wahba, H. A. Warda, *Physics of Fluids* **34**, 103303 (2022)
- [5] Danilo P. F. Silva, Rodrigo C. V. Coelho, Ariel Dvir, Noa Zana, Margarida M. Telo da Gama, Naomi Oppenheimer, Nuno A. M. Araújo. *arXiv:2504.01581*