

# Simulação Computacional dos Materiais

---

***Caetano Rodrigues Miranda***

***IFUSP***

*crmiranda@usp.br*

***AULA 1 – 20/08/2020***

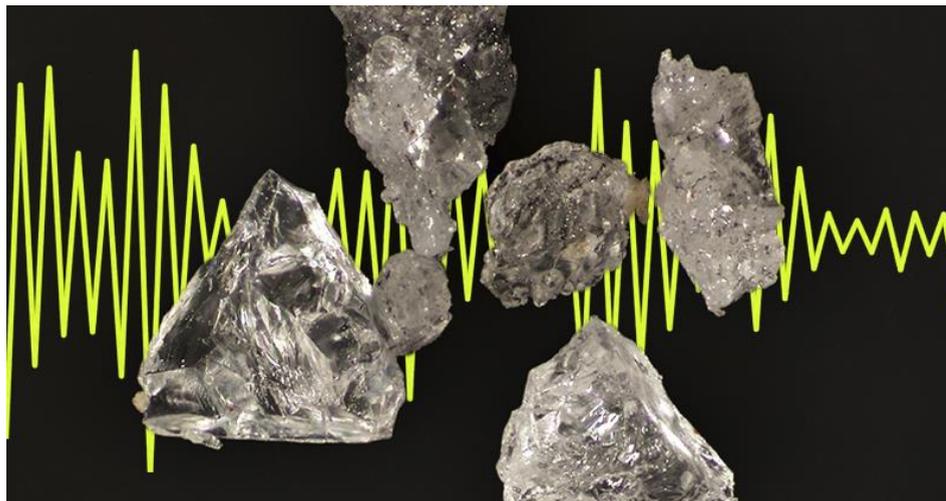
***Parte A***



# Simulação Aplicada em Materiais: Propriedades Atomísticas



TV USP - 01/10/2018  
Cientistas utilizam realidade virtual para criar novos materiais



Cientistas utilizam **realidade virtual** para criar novos materiais

*sampa*

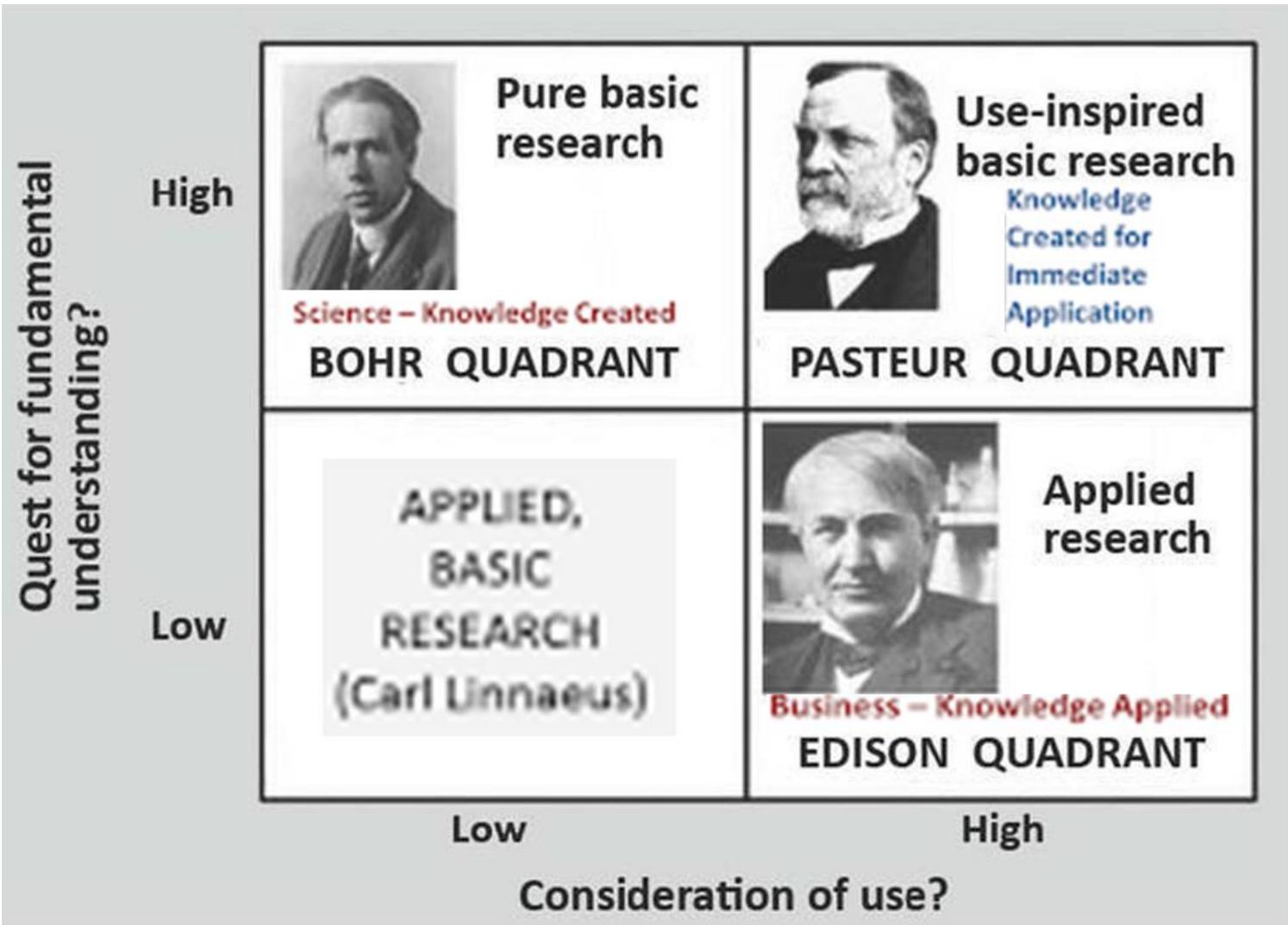


# Visão e Missão

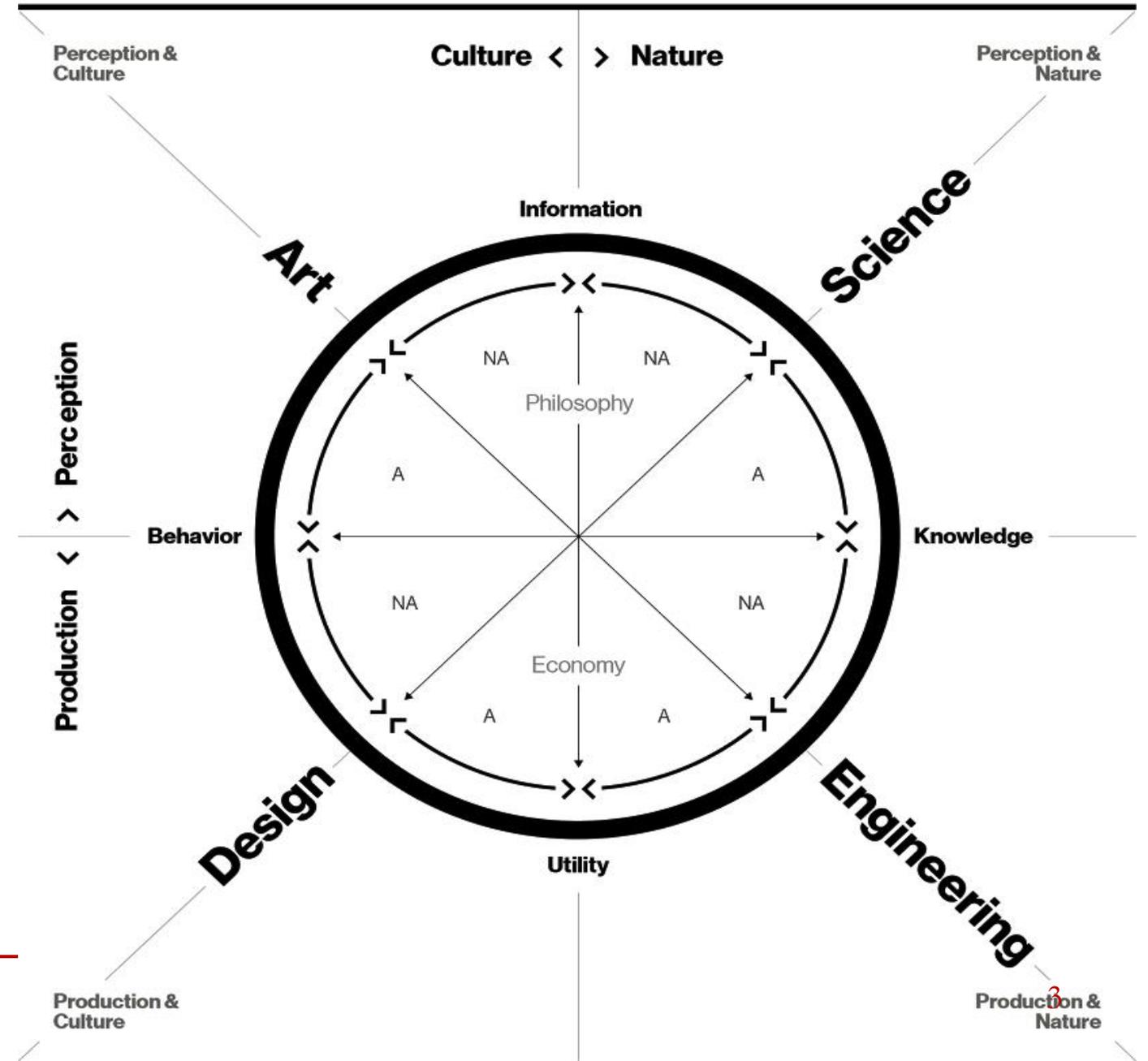
# Krebs Cycle of Creativity

Neri Oxman, January 2016

**Key**  
 A Applied  
 NA Non-Applied



Donald E. Stokes, *Pastor's Quadrant – Basic Science and Technological Innovation*





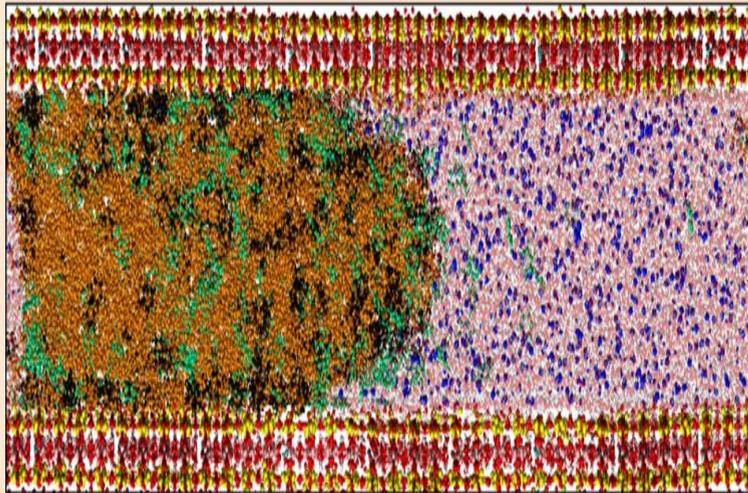
Como o conhecimento das interações atômicas e moleculares podem contribuir no desenvolvimento tecnológico e inovação industrial ?

---



# De modelos simples para soluções aplicadas

---



## *Simulação computacional em multiescala:*

- Modelos complexos
- Aproximação controlada
- Condições reais
- Escala Molecular "Microscópica"
- Soluções baseadas no conhecimento adquirido

## *Setor produtivo:*

- Sistemas complexos
- Heterogeneidade
- Condições reais
- "Macroscópico"
- Método de tentativa e erro

# Simulação Computacional dos Materiais

---

- **Prof. Caetano Rodrigues Miranda**
- **Período: Noturno**
- **Horário: Quintas 19:00h às 21:00h**  
**Sextas 19:00h às 21:00h**
- **Local: Cyberspace**

**Home-page:**

**<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=81994>**

- **Calendário da disciplina (tópicos, experimentos, ...)**
  - **Notas de aula**
  - **Projetos**
  - **Conceitos, etc.**
-

# Equipe

---



Caetano R. Miranda  
crmiranda@usp.br  
Física



Camilo A. Salvador  
cafsss@gmail.com  
Eng. de Materiais



Gabriela Dias  
gabidias@usp.br  
Química



Michele Salvador  
michelesalvador@usp.br  
Física



Daniela A. Damasceno  
daniela.damasceno@usp.br  
Fab. Mecânica



Alexsandro Kirch  
alexsandrokirch@gmail.com  
Física



Henrique M. Cezar  
henrique.cezar@usp.br  
Física Computacional



Bruno F. Zornio  
bruno.zornio@gmail.com  
Química



Elizane Moraes  
elizane.fisica@gmail.com  
Física



Alvaro D. Torrez  
alvaro.torrez.b@gmail.com  
Eng. de Computação

# Simulação Computacional dos Materiais

---

## ***Objetivos:***

Introduzir os principais métodos computacionais utilizados em Física dos Materiais em diferentes escalas (nano-micro, meso e macro)

Aplicações dessas técnicas na caracterização e determinação das propriedades dos materiais.

Ênfase será dada através de práticas "hands-on", "design thinking" e estudos de caso na indústria e artigos científicos recentes.

# Simulação Computacional dos Materiais

---

- Método: Base - Exploração - Aplicação
  - Discussão do sistema físico
  - Introdução ao método numérico
  - Modelagem do sistema físico
  - Visualização dos resultados
- Organização: Aulas + Laboratório
- Avaliação: Labs + Projeto

# Hands-on

---

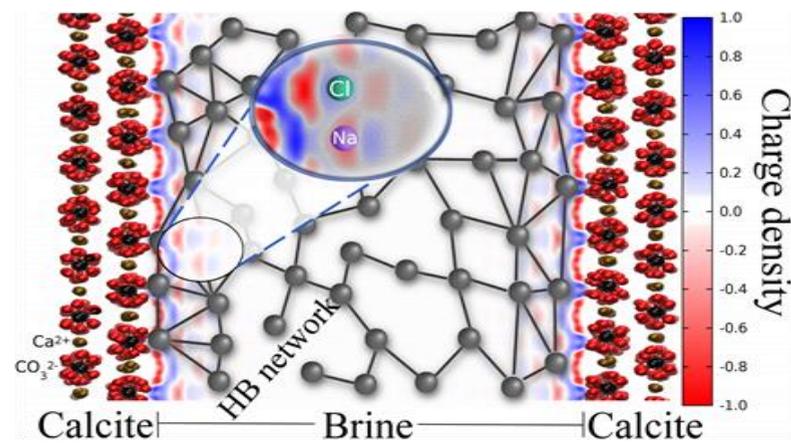
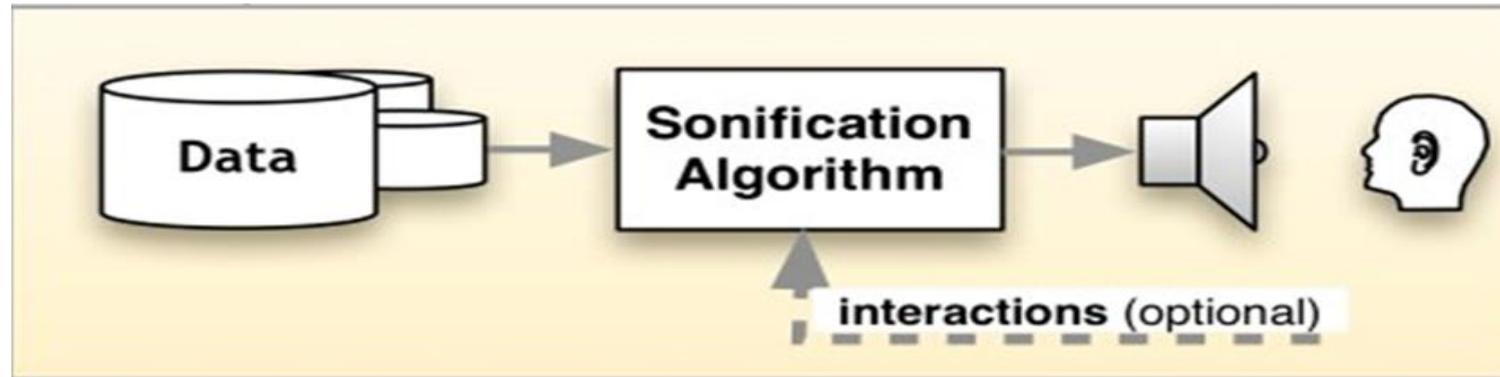
- Ambientação (Máquina virtual, acesso remoto, Linux)
- Modelagem e Simulação em Física dos Materiais
  - i) Nano-Micro (Interações atômicas e moleculares, Cálculos de Estrutura Eletrônica e Simulações atomísticas)
  - ii) Meso (Teoria Cinética, Célula Autômata e Modelos na rede)
  - iii) Macro (Métodos do contínuo, Elementos discretos e finitos).
    - Modelagem em Multiescala, Triagem Computacional e Projetos em Design computacional de Materiais

# Experiências perceptivas, imersivas e inclusivas



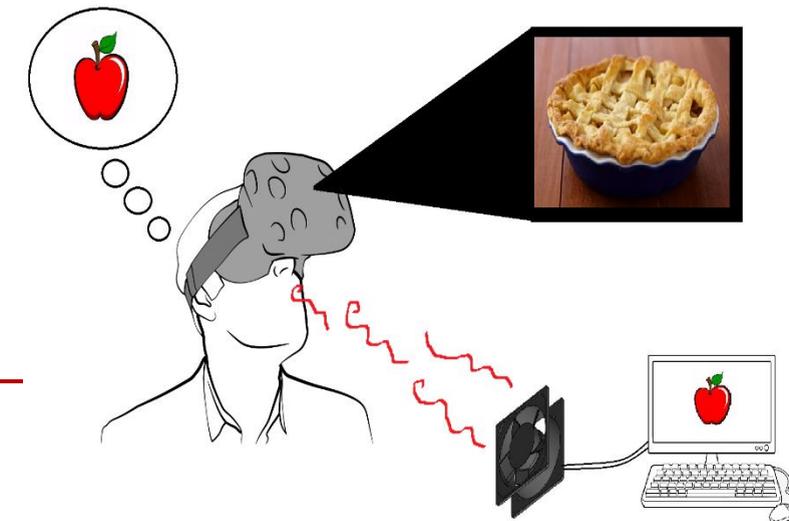
**Novas maneiras de “ver”, “ser” e “interagir”**  
**Realidade Virtual, Sonificação**

**Experiências imersivas e perceptivas em (VR)**  
**Dinâmica Molecular interativa em tempo real.**



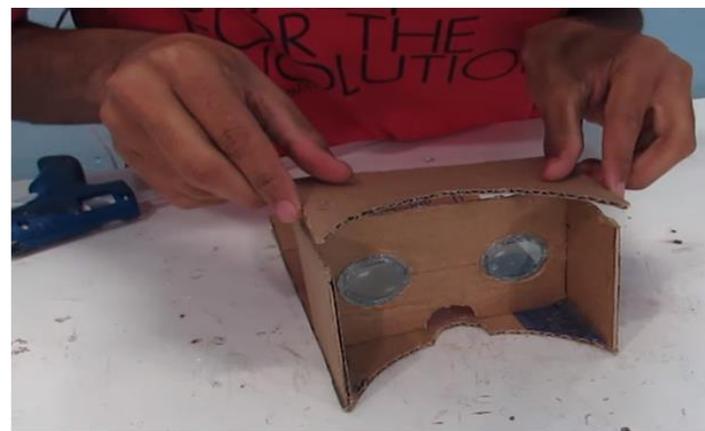
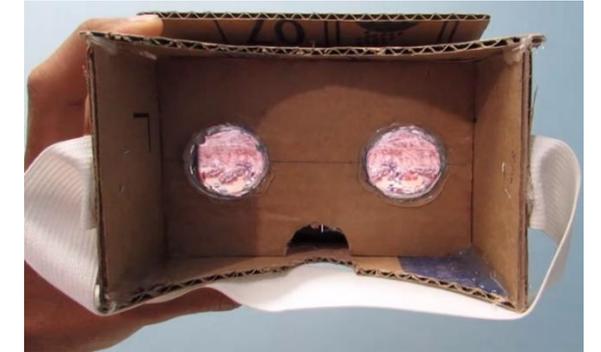
Frequenc:	Keyboard	Note name	MIDI number
4186.0		C8	108
3951.1		B7	107
3729.3		A7	106
3520.0		G7	105
3322.4		F7	104
3136.0		E7	103
2960.0		D7	102
2793.8		C7	101
2637.0		B6	100
2489.0		A6	99
2349.3		G6	98
2217.5		F6	97
1975.5		E6	96
1864.7		D6	95
1760.0		C6	94
1661.2		B5	93
1568.0		A5	92
1480.0		G5	91
1396.9		F5	90
1318.5		E5	89
1244.5		D5	88
1174.7		C5	87
1108.7		B4	86
1046.5		A4	85
987.77		G4	84
932.33		F4	83
880.0		E4	82
830.61		D4	81
783.99		C4	80
739.99		B3	79
698.46		A3	78
659.26		G3	77
622.25		F3	76
587.33		E3	75
554.37		D3	74
523.25		C3	73
493.88		B2	72
466.16		A2	71
440.0		G2	70
415.30		F2	69
392.00		E2	68
369.99		D2	67
349.23		C2	66
329.63		B1	65
311.13		A1	64
293.67		G1	63
277.18		F1	62
261.6		E1	61
246.94		D1	60
233.08		C1	59
220.00		B0	58
207.65		A0	57
196.00		G0	56
185.00		F0	55
174.61		E0	54
164.81		D0	53
155.56		C0	52
138.59		B-1	51
130.81		A-1	50
123.47		G-1	49
116.54		F-1	48
110.00		E-1	47
103.83		D-1	46
97.999		C-1	45
92.499		B-2	44
87.307		A-2	43
82.407		G-2	42
77.782		F-2	41
73.416		E-2	40
69.296		D-2	39
65.406		C-2	38
61.735		B-3	37
58.270		A-3	36
55.000		G-3	35
51.913		F-3	34
48.999		E-3	33
46.249		D-3	32
43.654		C-3	31
41.203		B-4	30
38.891		A-4	29
36.708		G-4	28
34.648		F-4	27
32.703		E-4	26
30.868		D-4	25
29.135		C-4	24
27.500		B-5	23
		A-5	22
		G-5	21

## Física do Cheiro



# Dispositivo VR para smartphone de baixo custo

- Material reciclável (papelão e garrafas de plástico)
- Oficina sobre como construir as lentes e montá-las como um dispositivo de realidade virtual



<http://digston.com/oculos-de-realidade-virtual-de-papelao-caseiro/>

# Motes do curso

---



"Vencerás pela Ciência"



*"Mente e mãos"*

**Exemplo** → **Caso conhecido** → **Desconhecido** →  
**Conhecimento** → **Disseminação**

# Bibliografia

---

- Notas de aula
- Artigos relevantes ao método
- Adalberto Fazzio, José David M. Vianna, Sylvio Canuto, *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional*, Editora Livraria da Física, 2004.
- Richard LeSar, *Introduction to Computational Materials Science*, Cambridge University Press, 2013.
- Richard M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press, 2008.
- Dierk Raabe, *Computational Materials Science*, Wiley-VCH 1998
- Daan Frenkel e Berend Smit, *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, 2 ed., 2001.
- M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids*, Clarendon Press, 1987.

---

Todo o material relevante será disponibilizado

# Simulação computacional dos materiais – Edição 2020

---

## ***Aulas e laboratórios***

### ***Objetivo: aprender divertidamente explorando***

- Síncronas e assíncronas (Lives e vídeos de 20 min)
- Cada aula (4 partes – 20 min com 5 min de intervalo)
- Máquina virtual e/ou acesso remoto
- Engajamento e contato contínuo
- Transmedia (E-disciplinas, Instagram, whatsapp, ...)
- Participação importante: atividades coletivas (artigos)
- Discussão em grupos (3 membros) – Design Sprint
- Gamificação

# Simulação computacional dos materiais – Edição 2020

---

## ***Ambientação***

Montagem das máquinas virtuais e acesso remoto

Introdução ao Linux, programas de visualização e VR

Bibliografia a ser distribuída

Dúvidas: de imediato use ***hotlines***

# Tenho dúvidas nas aulas assíncronas ... o que fazer ?

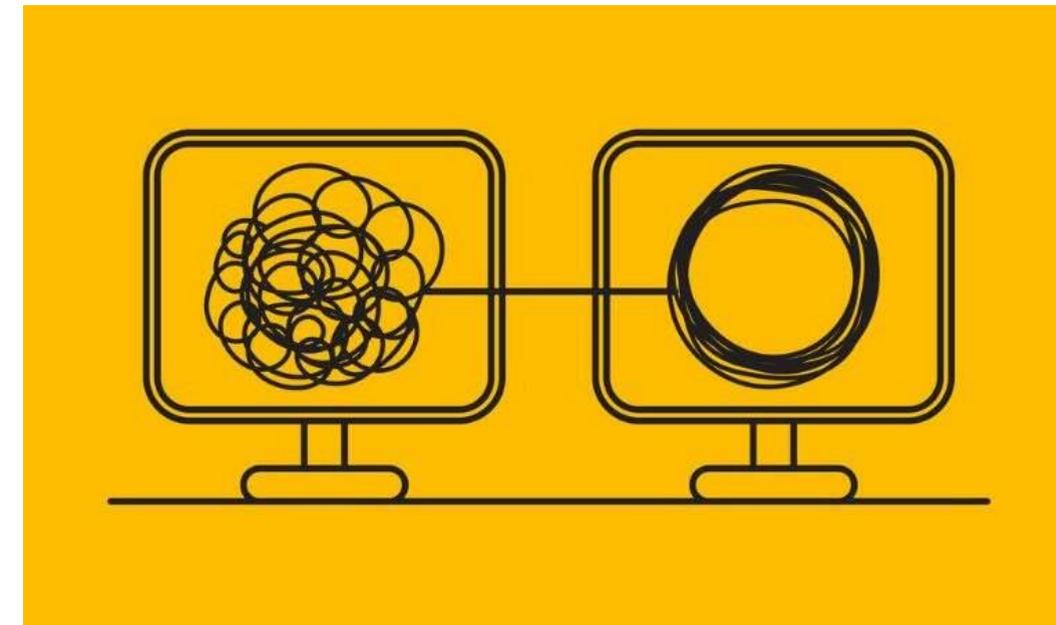


Dúvidas use o HOTLINE:

[crmiranda@usp.br](mailto:crmiranda@usp.br)

Assunto: SCM2020

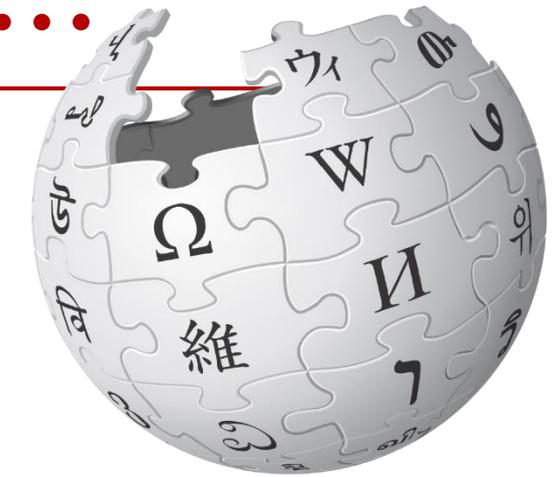
Whatsapp: SCM2020



***Todas as dúvidas serão comentadas no início das aulas.  
Projetos e Labs: whatsapp***

# Nota ? Artigos, projetos, idéias, disseminação...

---

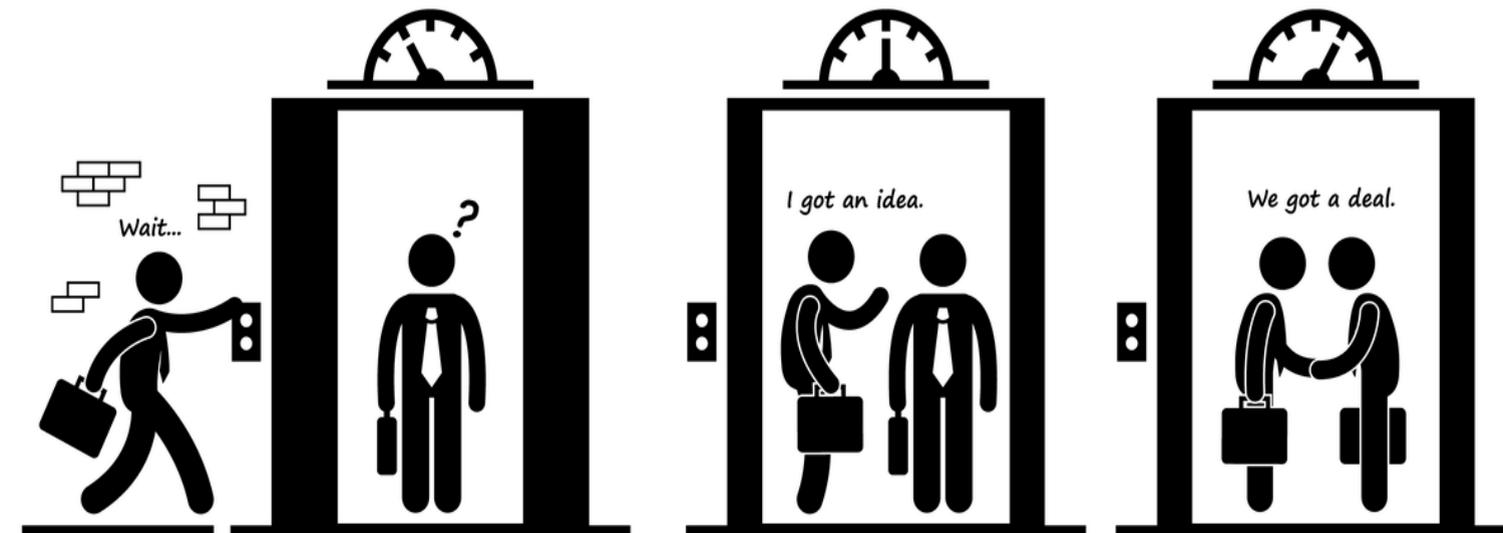


## Hands-on e Projeto:

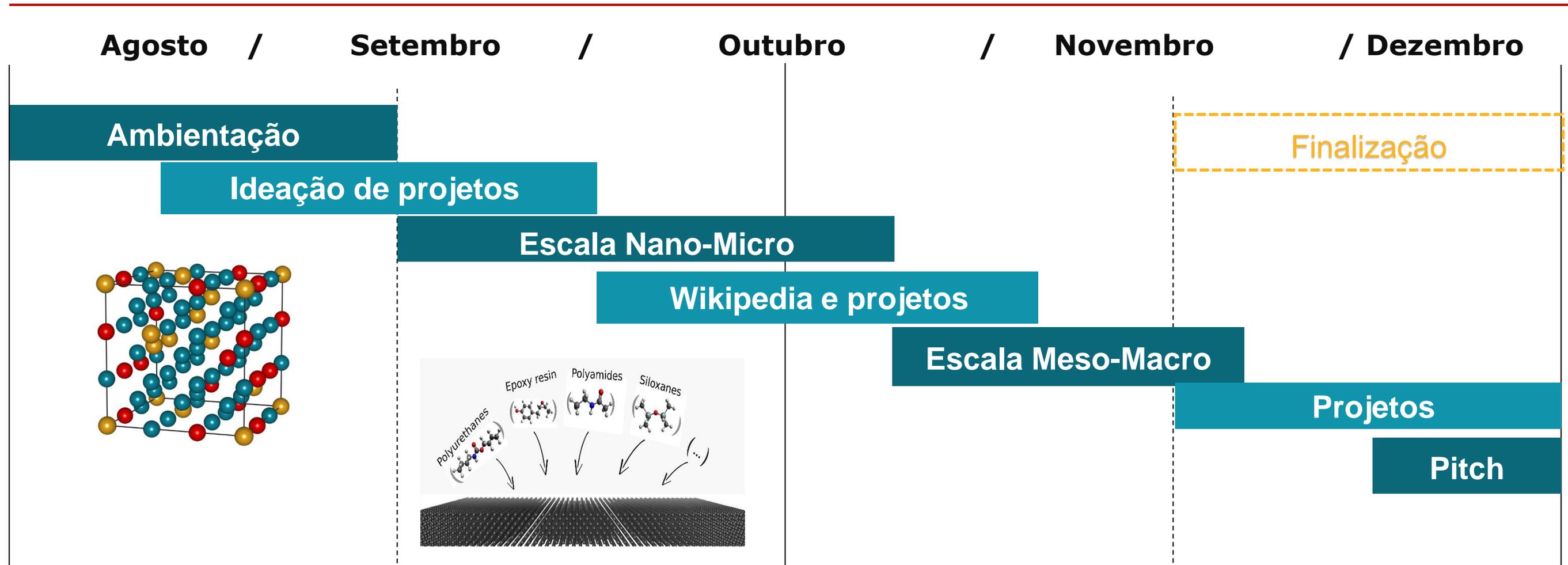
Meta =  $0.3 * Labs + 0.2 * Wikipedia + 0.2 * Projetos + 0.3 * Pitch$

## Ideação, Relatórios e *Pitch*

WIKIPÉDIA  
A enciclopédia livre



# Cronograma

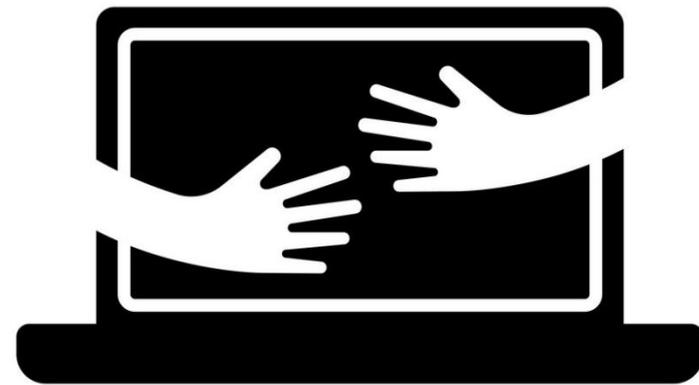


**Métodos Multiescala  
Aprendizado de máquina**

# Projeto Acadêmico ou Empreendedorismo ?

---

## ***Projeto Científico***



## ***Start-up***



# Projetos

<b>Áreas prioritárias de pesquisa definidas pelo MCTI para o período 2020-2023</b>				
<b>Tecnologias Estratégicas</b>	<b>Tecnologias Habilitadoras</b>	<b>Tecnologias de Produção</b>	<b>Tecnologias para o Desenvolvimento Sustentável</b>	<b>Tecnologias para Qualidade de Vida</b>
• Espacial	• Inteligência Artificial	• Indústria	• Cidades inteligentes	• Saúde
• Nuclear	• Internet das coisas	• Agronegócio	• Energias renováveis	• Saneamento básico
• Cibernética	• Materiais avançados	• Comunicações	• Bioeconomia	• Segurança hídrica
• Segurança pública	• Biotecnologia	• Infraestrutura	• Resíduos sólidos	• Tecnologias assistivas
• De fronteira	• Nanotecnologia	• Serviços	• Poluição	
			• Desastres naturais	
			• Preservação ambiental	

# Design Thinking / Design Sprint



# Planejamento dos projetos (Agosto a Dezembro 2020)

## *Google Design Spring*

---

**AGOSTO**

dia **1**



**entender  
definir**

- who are the users
- what are their needs
- what is the context
- competitor review
- formulate strategy

**SETEMBRO**

**2**



**divergir**

- envision
- develop lots of solutions
- ideate

**OUTUBRO**

**3**



**decidir**

- choose the best idea
- storyboard the idea

**NOVEMBRO**

**4**



**prototipar**

- build something quick and dirty to show to users
- focus on usability not making it beautiful

**DEZEMBRO**

**5**



**validar**

- show the prototype to real users outside the organisation
- learn what doesn't work

## 1. ANÁLISE GERAL DA PROPOSTA

1.1 A "Análise Geral da Proposta" deve sintetizar os 3 itens de análise deste formulário: 1. Análise do Projeto de Pesquisa; 2. Histórico acadêmico do Candidato; 3. Histórico de Pesquisa do Supervisor. Por favor preencha este item depois de preencher o restante do formulário.

## 2. Por favor, analise o PROJETO DE PESQUISA proposto, conforme roteiro abaixo:

### 2.1 Definição e pertinência dos objetivos.

2.2 Originalidade e importância da contribuição pretendida para a área do conhecimento em que o projeto proposto se insere.

### 2.3 Fundamentação científica e os métodos empregados.

### 2.4 Adequação do projeto a um programa de pós-doutorado.

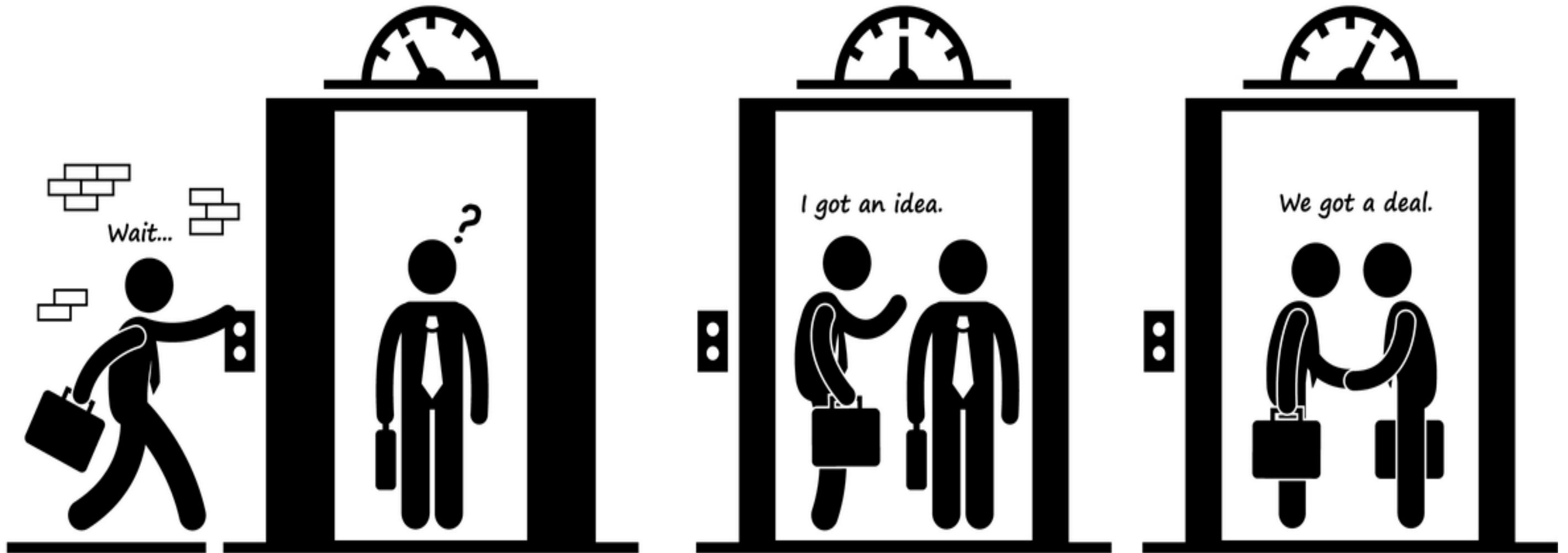
2.5 Análise da viabilidade da execução do projeto utilizando a infra-estrutura disponível e no prazo previsto.

2.6 Conclusão sobre a análise do Projeto de Pesquisa apresentado. (Preenchimento obrigatório)

- Excelente
- Muito boa
- Muito boa, com algumas deficiências facilmente sanáveis
- Boa
- Boa com deficiências
- Regular
- Com sérias deficiências

# Pitch (3 a 10 min para nos convencer)

---





# Wikipedia

---

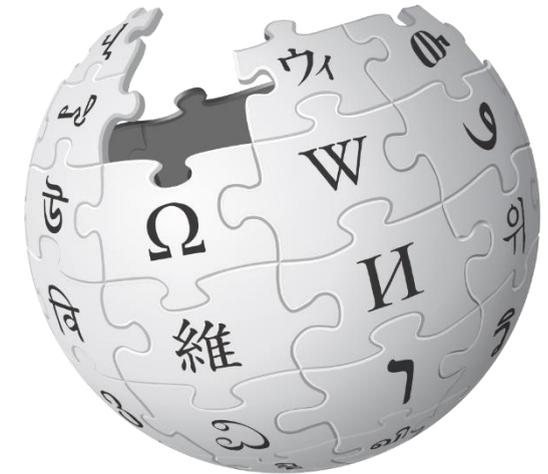
Dinâmica Molecular

Monte Carlo

Cálculos de primeiros princípios

Elementos Finitos

Redes de Boltzmann



**WIKIPÉDIA**  
A enciclopédia livre

# Atividade 1

## Formulário – perfil, necessidades e interesses

---

<https://forms.gle/pkENhK7T6A9LrvxR6>