

# Simulação Computacional dos Materiais

---

**Caetano Rodrigues Miranda**

**IFUSP**

*crmiranda@usp.br*

**AULA 4 – 28/08/2020**

**Parte A**



*sampa*



# 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	

# Projetos – 1º ciclo

Projeto	Nome / # USP / Preferência 1
<b>P1</b> - Shape memory alloys (Nb-Ti-Al)	Wellington / 8962036 Lauro Barreto Braz / 10740015 João Henrique Mazo / 4503057 Gabriel Farias Caccáos / 9017377
<b>P2</b> - <u>Materiais sob condições extremas</u>  <u>com Aprendizado de Máquina</u>	<u>Bruno Penteado 10300723</u> <u>Brian Yurgel Moreira 9366422</u> <u>Gabriel Rodrigues 9783341</u> <u>Ricardo Rosa Junior 10300636</u>
<b>P4</b> - Descoberta de ligas resistentes a temperatura por aprendizado de máquina	Andre Vergili 9796871 Bianca 4683601 jessica copel 10300403 Nicholas Funari 9359365 Thomas Felipe 10300560 Alexandre Teixeira 9301109

Projeto	Nome / # USP / Preferência 1
<b>P9</b> - Materiais nanoestruturados para aplicações de energia e infraestrutura	Maurício 10300810 Kelvin 8522595 Deivid Paschoa 9898307
<b>P10</b> - Distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li	Andre Vergili 9796871 Vitor 7697290
<b>P15</b> - Estudo de membranas a base de carbono para desalinização da água	Rafaela Felix 10352541 Renan de Assis 9865401 Deivid Henrique 11277149 Teresa 9796662

**Oportunidades de bolsas**  
**IC, Mestrado, Doutorado, Pós-doc**  
**Grupo Sampa – IFUSP**



*sampa*

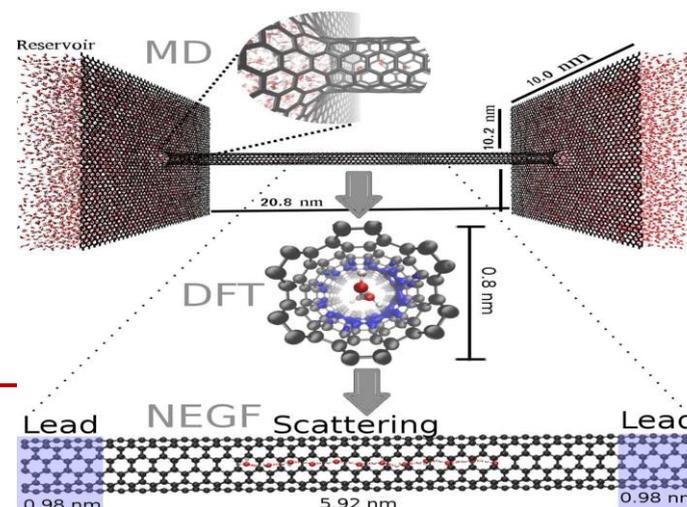
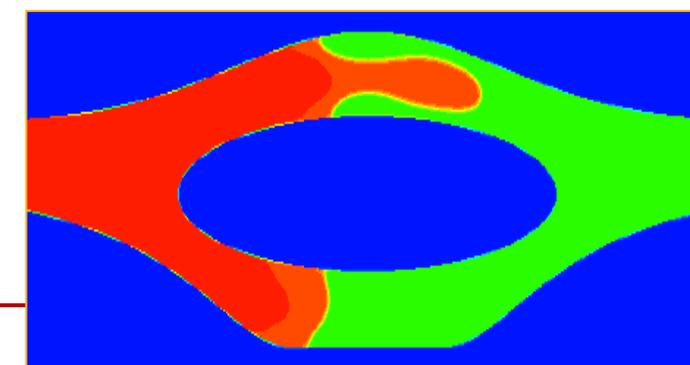
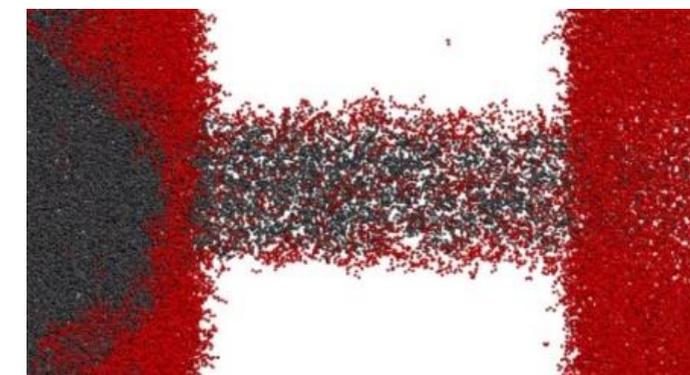
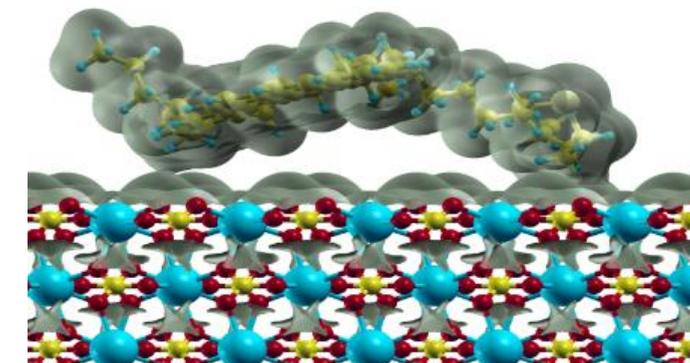
**Projeto PUB 2584**

Nanotecnologia, Física dos Materiais e Tecnologias Imersivas

**Contato: Prof. Caetano R. Miranda - [crmiranda@usp.br](mailto:crmiranda@usp.br)**

*Financiamento: Temático FAPESP, CNPq, Bolsas de convenios Petrobras/Repsol/Shell*

- **Nanotecnologia aplicada a Indústria do Petróleo e Gás, Energia renováveis, Infraestrutura e Alimentos**
- **Simulações computacionais em Multiescala**
- **Materiais sob condições extremas e nanofluídica**
- **Física Perceptiva, Realidade Virtual e Sonificação**



# Bolsa – Programa Santander USP de Inovação e Empreendedorismo

<http://www.inovacao.usp.br/criacaostartup2020/>

The screenshot shows a web browser window with the URL <http://www.inovacao.usp.br/criacaostartup2020/>. The browser's address bar shows the URL and a warning icon indicating the site is not secure. The website's header features the AUSPIN logo (Agência USP de Inovação) and the slogan "O DESENVOLVIMENTO PASSA PELA INOVAÇÃO." Below the header is a navigation menu with items: A Agência, Serviços, Propriedade Intelectual, Transferência de Tecnologia, Empreendedorismo, and Eventos. The main content area displays a news article titled "Programa Santander USP de Inovação e Empreendedorismo / Criação de Startup Edição 2020" by RNINA, dated 05/08/2020. The article text includes: "DISPÕE SOBRE O PROGRAMA SANTANDER-USP, EDIÇÃO 2020, SOB A GESTÃO ACADÊMICA E ADMINISTRATIVA DA AGÊNCIA USP DE INOVAÇÃO QUE VISA APOIAR O PROGRAMA STARTUP USP." and "Da Caracterização do Edital Santander Universidades: Bolsas de incentivo a Startup USP". The article begins with "O Programa Santander Universidades-USP/ de bolsas de incentivo a Startup/USP é uma ação da USP por meio da Agência USP de Inovação, que visa selecionar estudantes de graduação de elevado mérito acadêmico para". The browser's taskbar at the bottom shows the Windows search bar and several application icons.

# Simulação de sistemas reais

---

## 1) *Modelo físico:*

**Representação do sistema a partir de um conjunto de regras que descrevem seu comportamento.**

## 2) *Computação:*

**Aplicação das técnicas que permitem o cálculo das propriedades atomísticas em diferentes escalas de espaço-temporais.**

## 3) *Validade :*

**Comparar os resultados obtidos com dados experimentais e validar teoria, simulação e experimento.**

---

# Enfoque computacional em Física

---

## 1) *Modelo Físico:*

**Modelo:** descrever o sistema real a partir de uma “estrutura” similar, porém mais simples.

**Ingrediente fundamental:**

***Conceito de Variável de Estado Generalizada***

# Categorias dos modelos

---

Aspecto	Tipo do modelo
Escala espacial	Macro, meso, micro, nano, subatômico
Dimensão espacial	1,2, 3 - D
Discretização	Continuum x discreto
Carácter preditivo	Determinístico, estocástico, estatístico
Carácter descritivo	Primeiros princípios, fenomenológico,
Evolução	Cinético x estático

# Ingredientes

---

## 1) *Variáveis independentes*

Livres para serem escolhidas

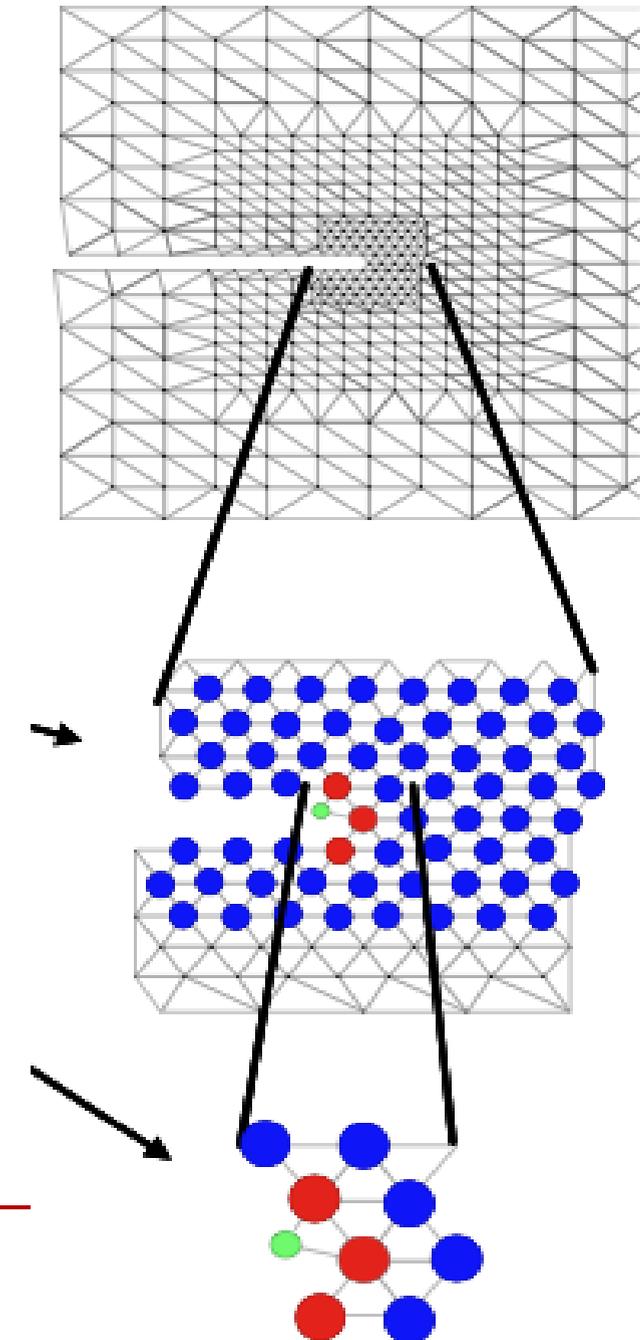
Ex. Modelagem de modelos de microestruturas

Tempo (t) e espaço (x,y,z)

Meso: posições e velocidades das discordâncias

Continuum: stress em cada elemento de volume em função da orientação cristalina e comportamento constitutivo.

Atomístico: posições e velocidades das partículas



# Ingredientes

---

## 2) Variáveis de estado

Funções das variáveis

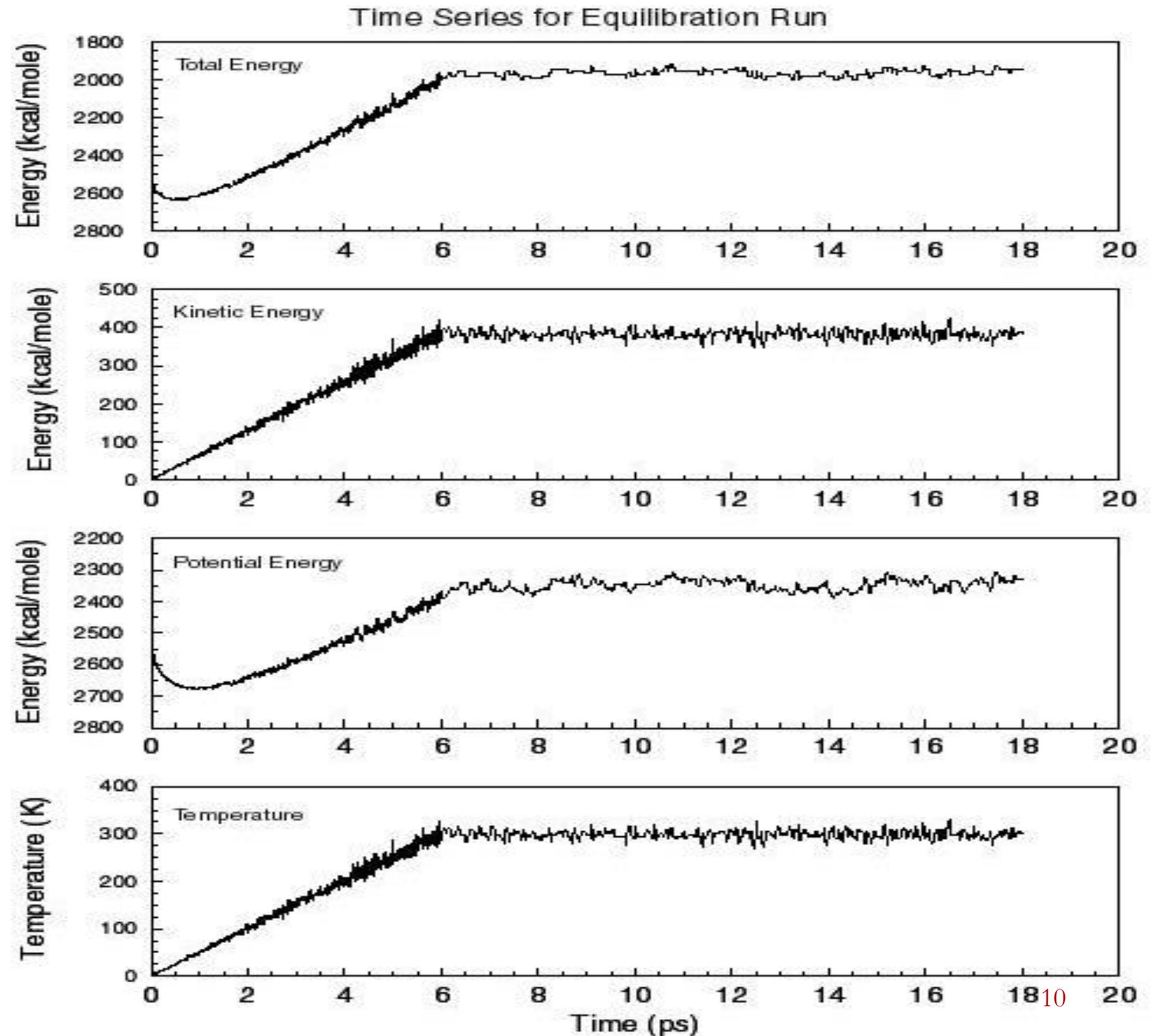
independentes

Ex. Temperatura (t)

Densidade de discordâncias

Concentração

---

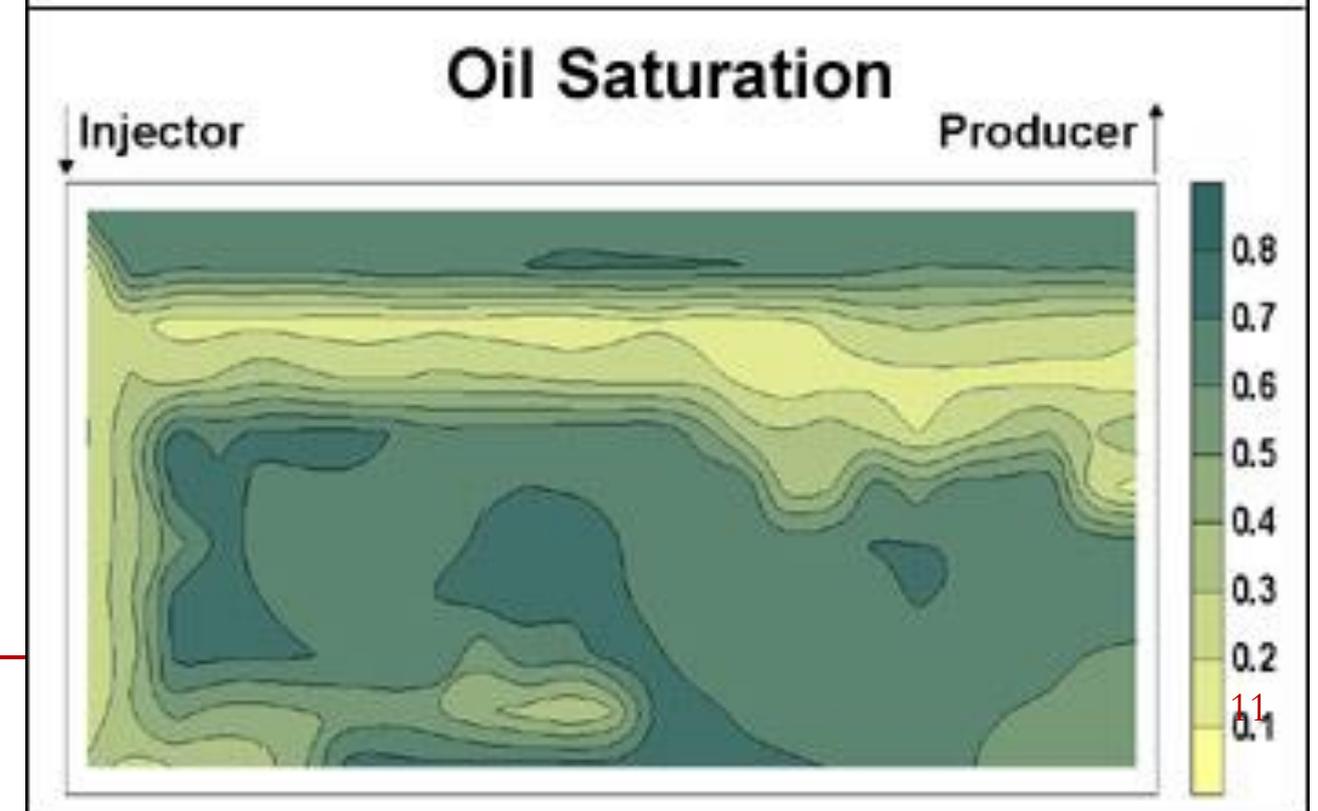
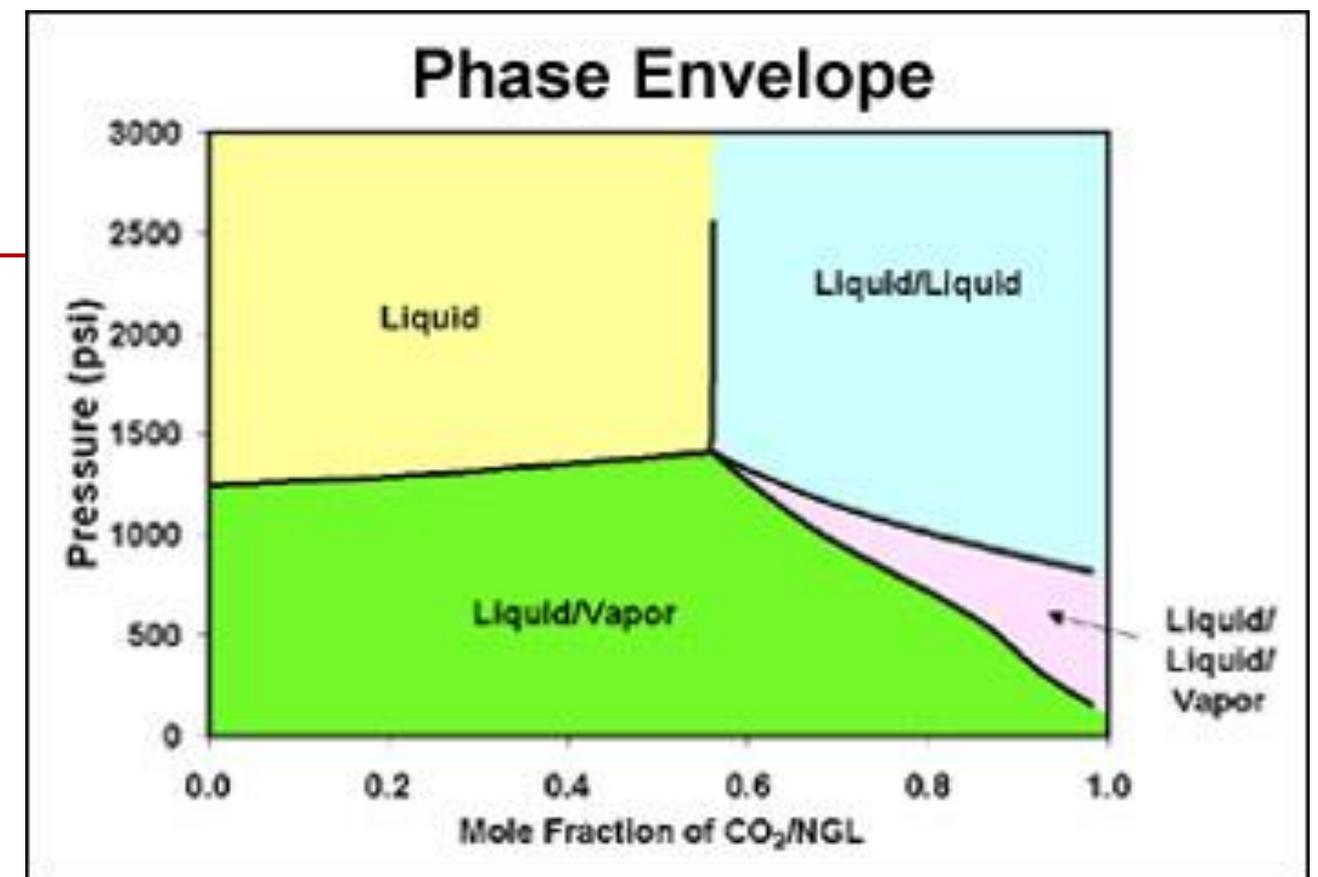


# Ingredientes

## 3) Equações de Estado

Descreve o estado do material em termos dos valores das variáveis dependentes

Ex: Stress : Lei de Hooke



# Ingredientes

---

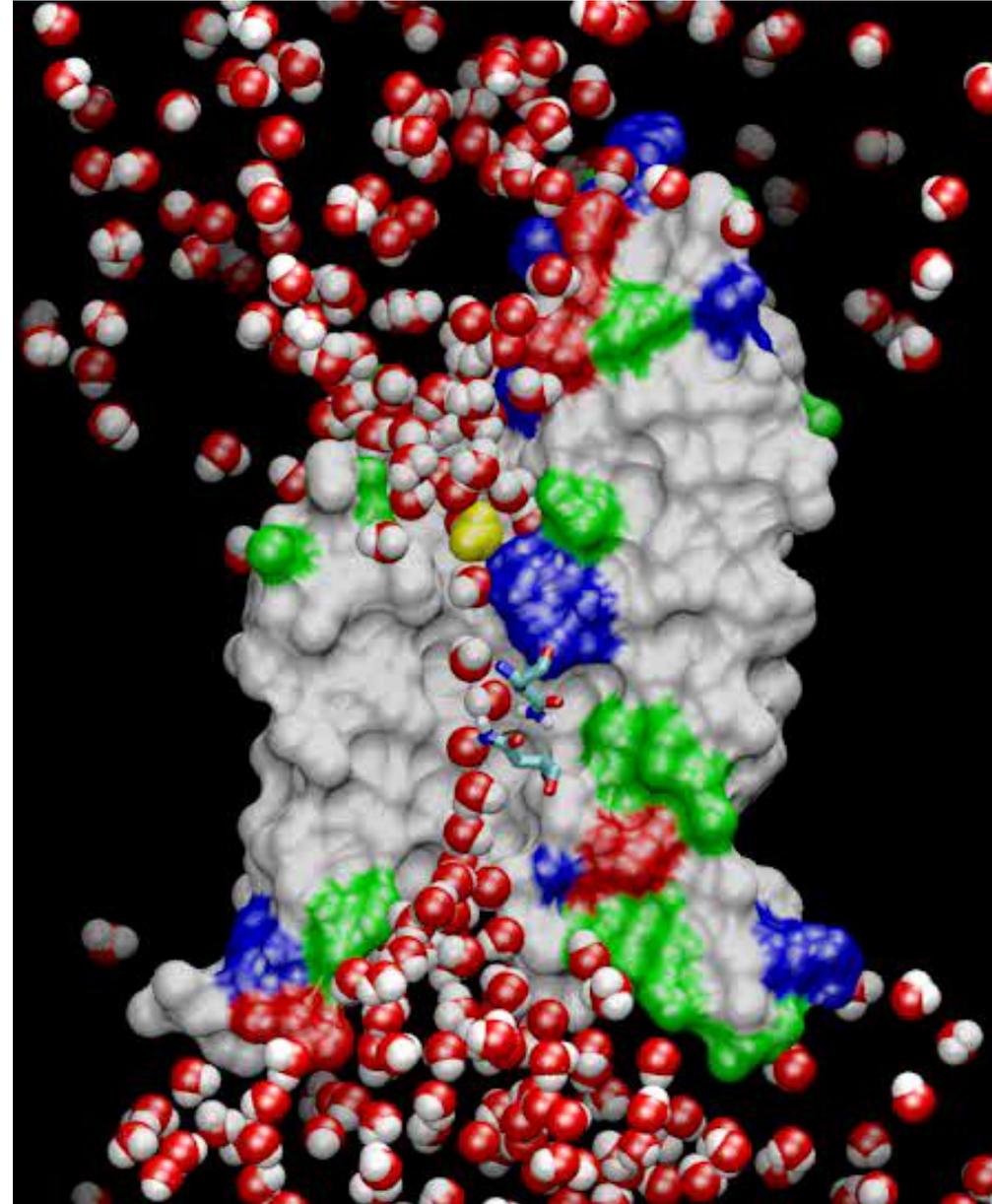
## 4) *Solução das Equações*

**Evolução do Sistema**

**Solução temporal das Equações de Newton.**

**Eq. de Schrodinger**

**Eq. de hidrodinâmica**



# Ingredientes

---

## 5) *Condições Físicas*

**Parâmetros físicos importantes**

**Condições iniciais e de contorno**

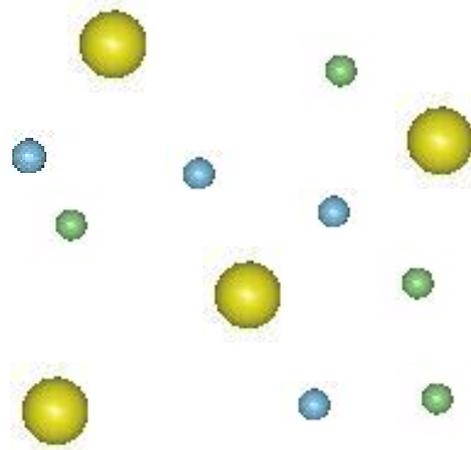
**Metodologia**



# Design virtual de materiais

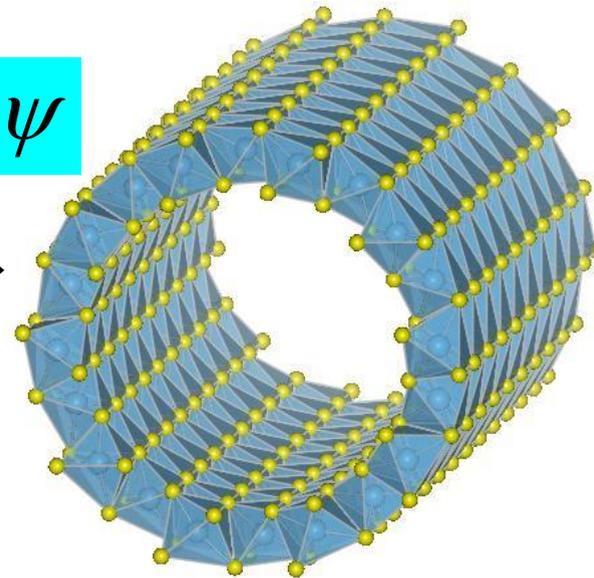
$$\langle \psi | \text{Melhor bateria} | \psi^* \rangle$$

Composição



Estruturas

$$H\psi = E\psi$$



Propriedades

Capacidade / Voltagem

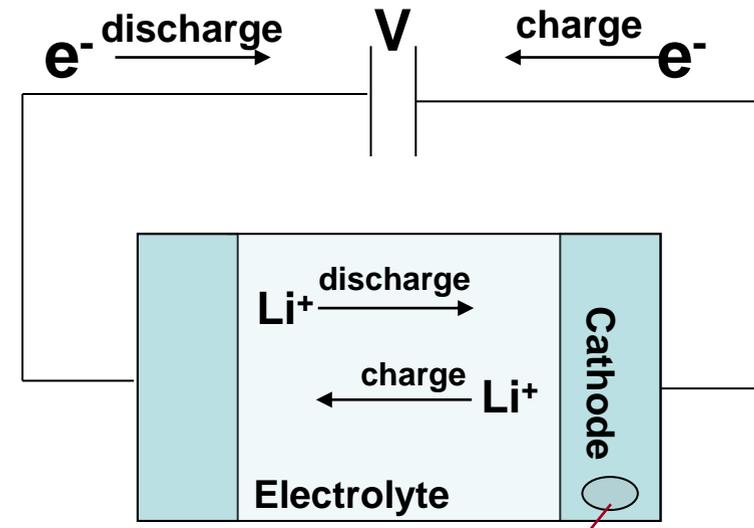
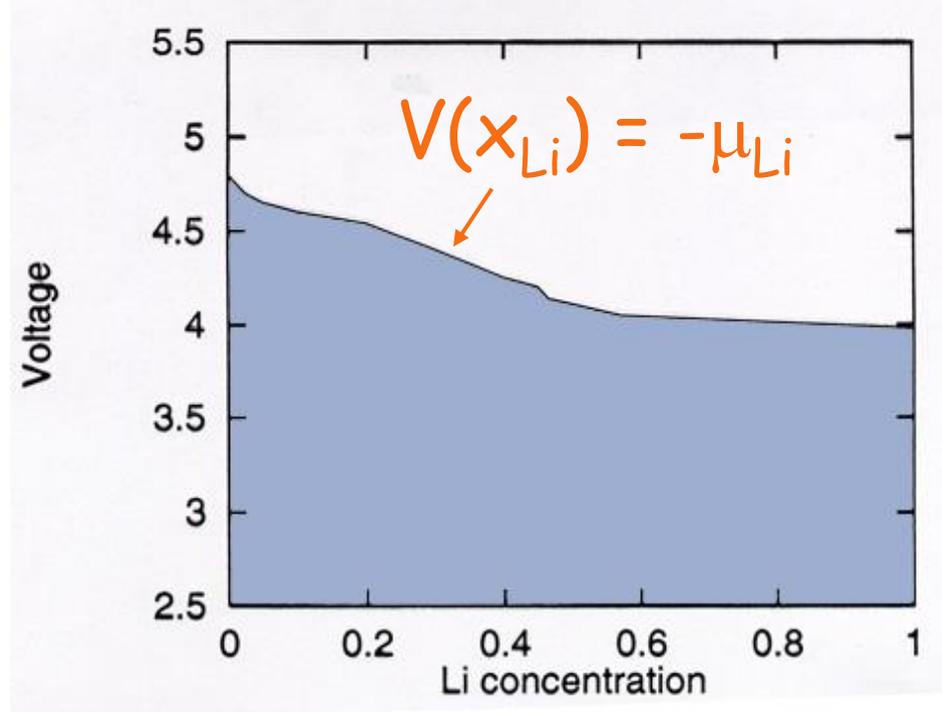
Parametro de rede

Densidade de carga

Estrutura eletrônica

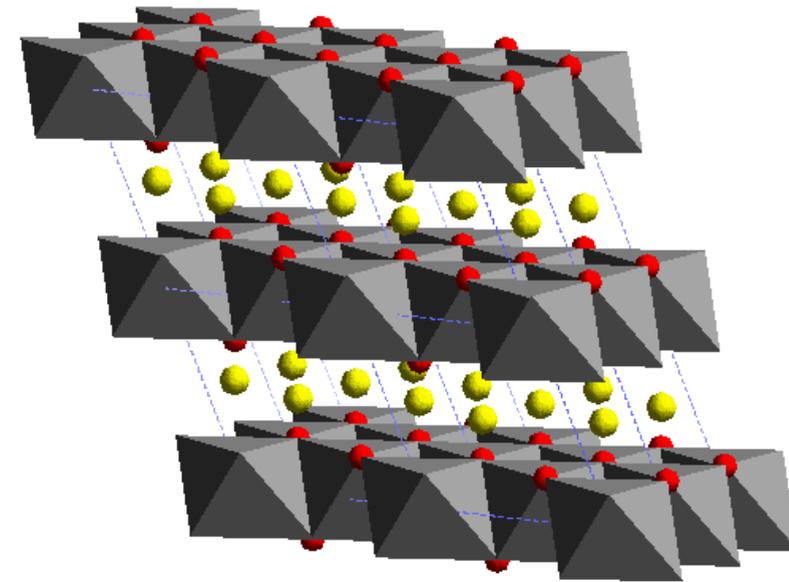
Barreira de ativação

# Voltagem é o potencial químico do Li



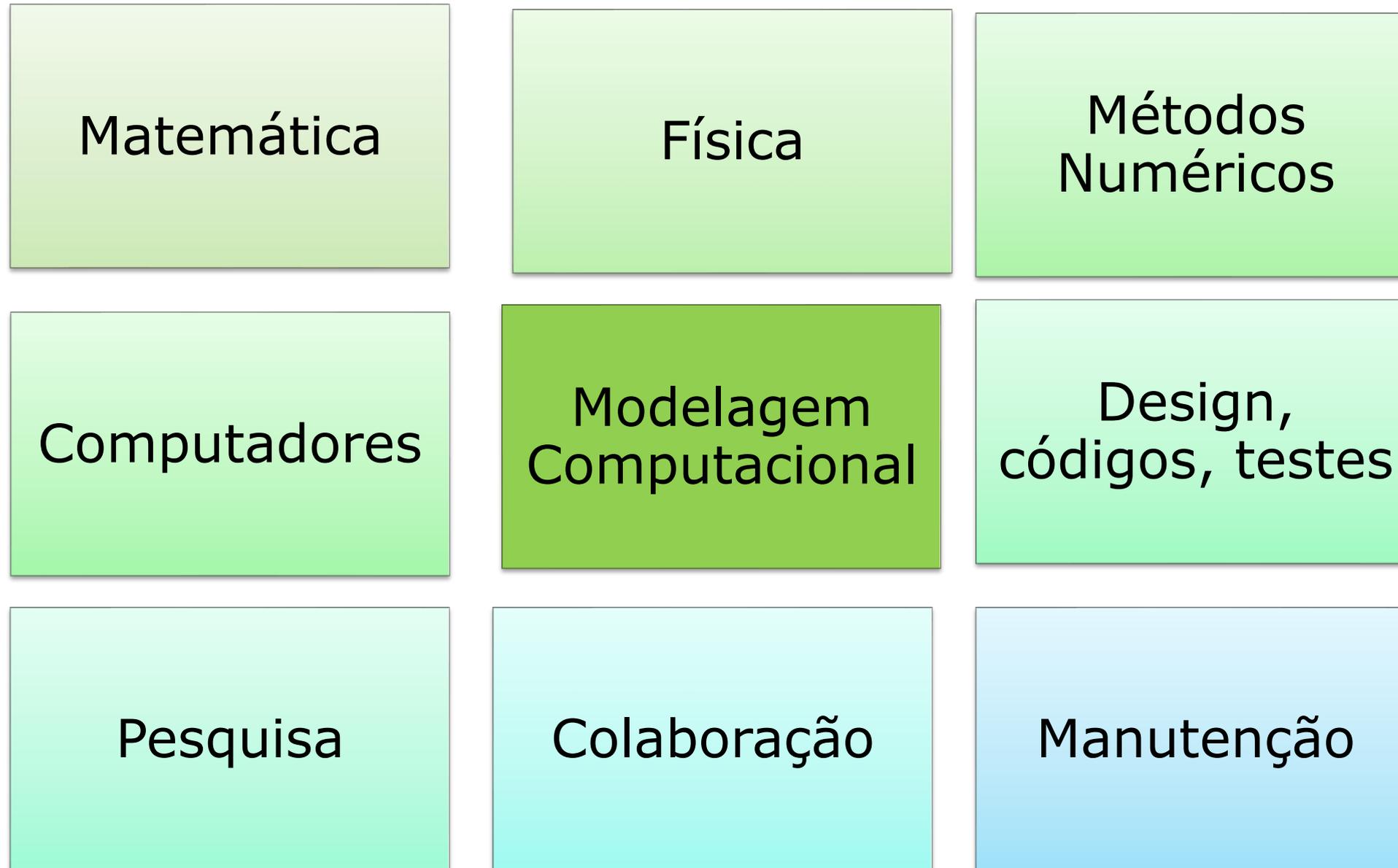
$$V(x) = - \left( \mu_{Li}(x) - \mu_{Li}^{ref} \right) \leftarrow \text{Extract Li}$$

$$\mu_{Li}(x) = \frac{\partial G}{\partial x_{Li}}$$



# Modelagem Computacional

---



# Questionamentos

---

- Quais problemas iremos atacar no projeto ?
- Objetivos ?
- Fenômenos envolvidos ?
- Escalas características (espacial e temporal) ?
- Possíveis contribuições ?
- Métodos e atividades
- Expectativas

# https://www.virtualbox.org/

Caixa de ent... | Inbox (11,82) | Correio :: Ent... | IDEAÇÃO DC | Universidade | Brazil's budg | Avisos | Oracle VM V

virtualbox.org

# VirtualBox

Welcome to VirtualBox.org!

search...  
Login Preferences

VirtualBox is a powerful x86 and AMD64/Intel64 [virtualization](#) product for enterprise as well as home use. Not only is VirtualBox an extremely feature rich, high performance product for enterprise customers, it is also the only professional solution that is freely available as Open Source Software under the terms of the GNU General Public License (GPL) version 2. See "[About VirtualBox](#)" for an introduction.

Presently, VirtualBox runs on Windows, Linux, Macintosh, and Solaris hosts and supports a large number of [guest operating systems](#) including but not limited to Windows (NT 4.0, 2000, XP, Server 2003, Vista, Windows 7, Windows 8, Windows 10), DOS/Windows 3.x, Linux (2.4, 2.6, 3.x and 4.x), Solaris and OpenSolaris, OS/2, and OpenBSD.

VirtualBox is being actively developed with frequent releases and has an ever growing list of features, supported guest operating systems and platforms it runs on. VirtualBox is a community effort backed by a dedicated company: everyone is encouraged to contribute while Oracle ensures the product always meets professional quality criteria.

[Download VirtualBox 6.1](#)

**Hot picks:**

- Pre-built virtual machines for developers at [Oracle Tech Network](#)
- **Hyperbox** Open-source Virtual Infrastructure Manager [project site](#)
- **phpVirtualBox** AJAX web interface [project site](#)

**News Flash**

- **New July 14th, 2020, 2020 VirtualBox 6.1.12 released!**  
Oracle today released a 6.1 maintenance release which improves stability and fixes regressions. See the [Changelog](#) for details.
- **New July 14th, 2020, 2020 VirtualBox 6.0.24 released!**  
Oracle today released a 6.0 maintenance release which improves stability and fixes regressions. See the [Changelog](#) for details.
- **New July 14th, 2020 VirtualBox 5.2.44 released!**  
Oracle today released a 5.2 maintenance release which improves stability and fixes regressions. See the [Changelog](#) for details.
- **New June 5th, 2020, 2020 VirtualBox 6.1.10 released!**  
Oracle today released a 6.1 maintenance release which improves stability and fixes regressions. See the [Changelog](#) for details.
- **New May 15th, 2020, 2020 VirtualBox 6.1.8 released!**  
Oracle today released a 6.1 maintenance release which improves stability and fixes regressions. See the [Changelog](#) for details.

Type here to search

1:46 PM 8/27/2020

# Espelho da máquina virtual

---

<https://drive.google.com/file/d/1UX4EC1AoNK5bnAt2a9XTX5ZxMF8mJSzU/view?usp=sharing>

USUARIO: sampa

SENHA: stds9