

Simulação Computacional dos Materiais

Caetano Rodrigues Miranda

Dra. Elizane Moraes

Dra. Michele Salvador

AULA 20 – 23/10/2020

IFUSP

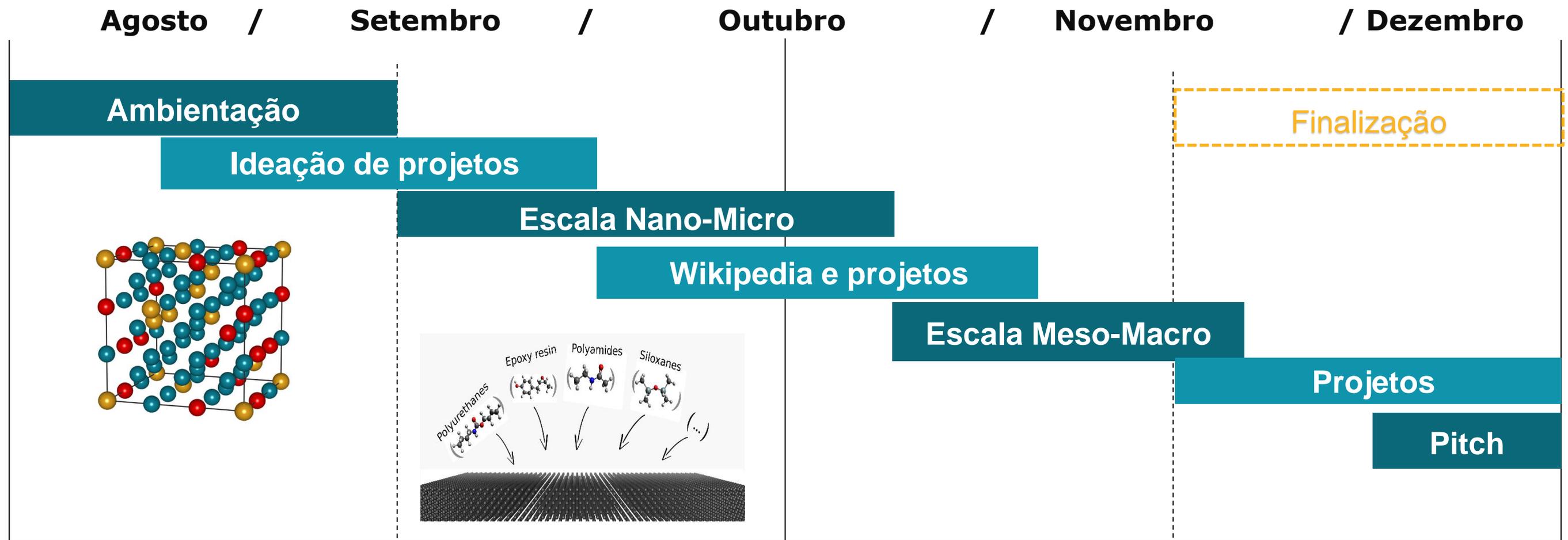
crmiranda@usp.br



sampa



Cronograma



**Métodos Multiescala
Aprendizado de máquina**

Cronograma

DECRETO N° 65.257, DE 19 DE OUTUBRO DE 2020 – alteração de data do feriado pela comemoração do Dia do Funcionário Público do dia 28 para dia 30 de Outubro

29/10 – Colóquio (17:00)

29/10 – Atividade wikipedia

30/10 – Não haverá aula

30/10 – novo prazo para o relatório do lab 4

05/11 – Discussão projetos

06/11 – Aprendizado de Máquina

14/11 – prazo para o relatório lab6

Wikipedia

Dinâmica Molecular

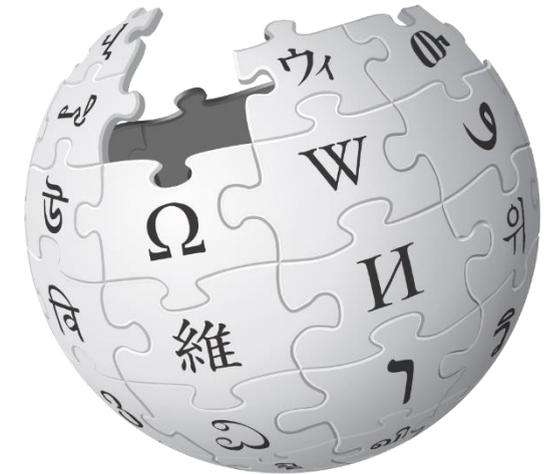
Monte Carlo

Cálculos de primeiros princípios

Aprendizado de máquina

Elementos finitos

Redes de Boltzmann



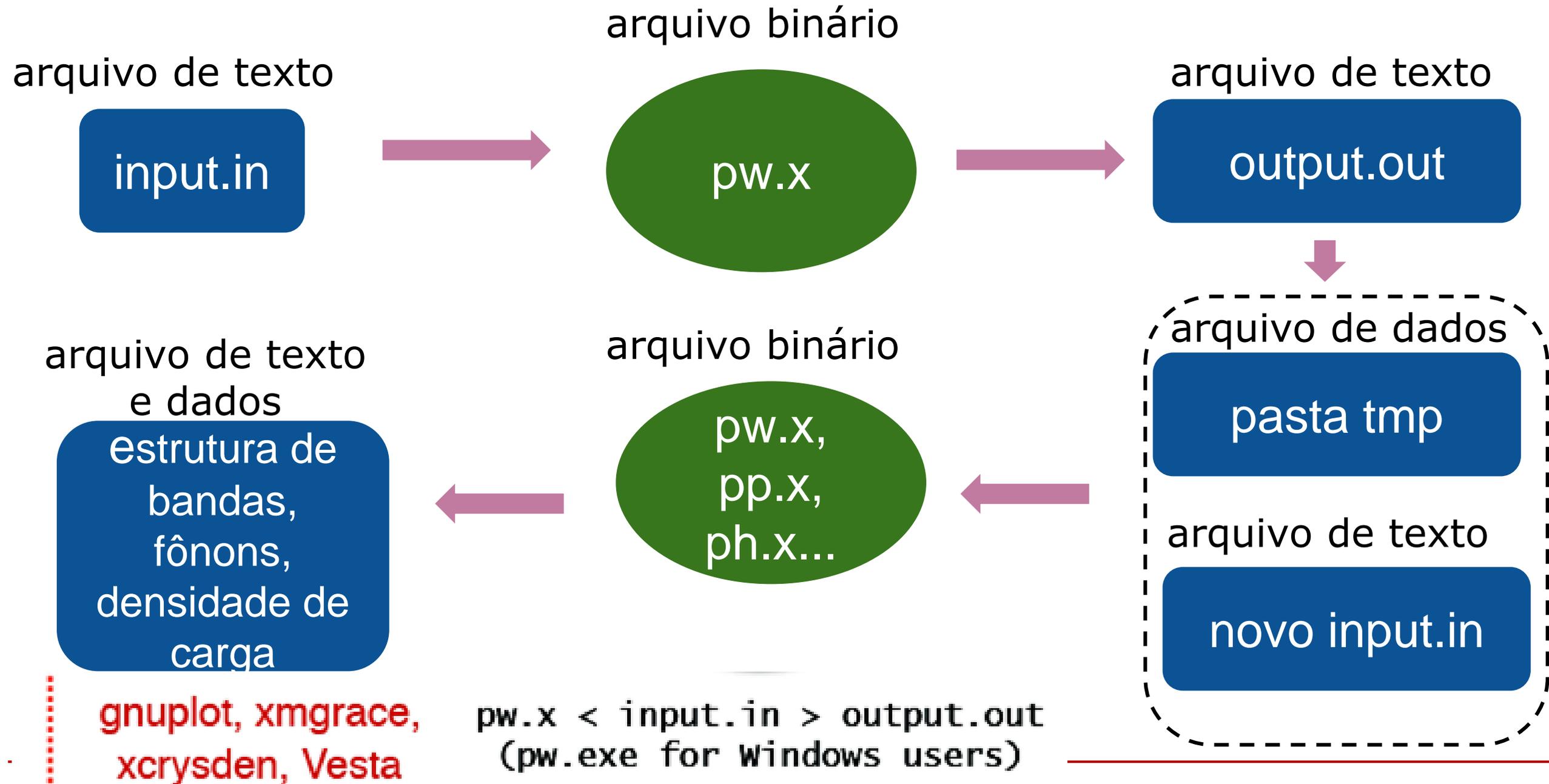
WIKIPÉDIA
A enciclopédia livre

<https://docs.google.com/document/d/1eAPzCqIkfTPSSSJwBlooAhSJs9ud9CFQ/edit#>



LABORATÓRIO
CÁLCULOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS
TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT)

Preparação para a prática



Práticas

Prática 0: cálculo de relaxação de uma molécula isolada.

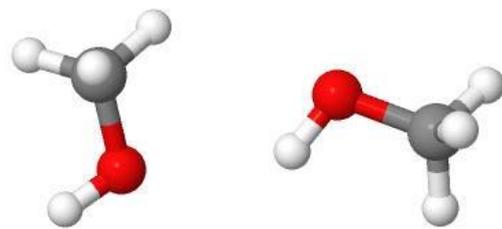
Será feito o cálculo de relaxação de uma molécula de metanol em uma caixa. O cálculo de moléculas isoladas é o mais simples e o resultado será utilizado na prática 3.

Prática 1: Testes iniciais com o Silício Si; (github)

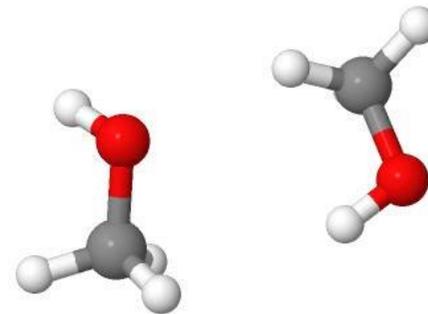
Prática 2: Testes com o Alumínio; (github)

Prática 3: Homodímeros de Metanol; (github)

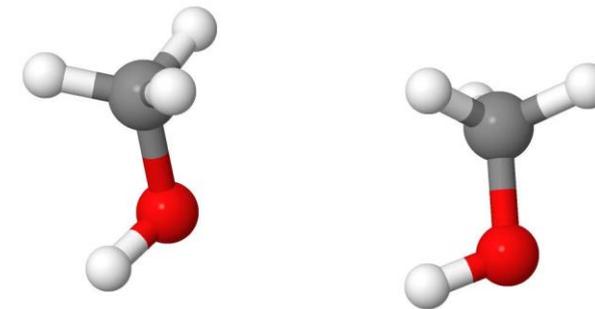
LAB 6 – Relatório



Jmol



Jmol



Jmol