

Simulação Computacional dos Materiais

Caetano Rodrigues Miranda

IFUSP

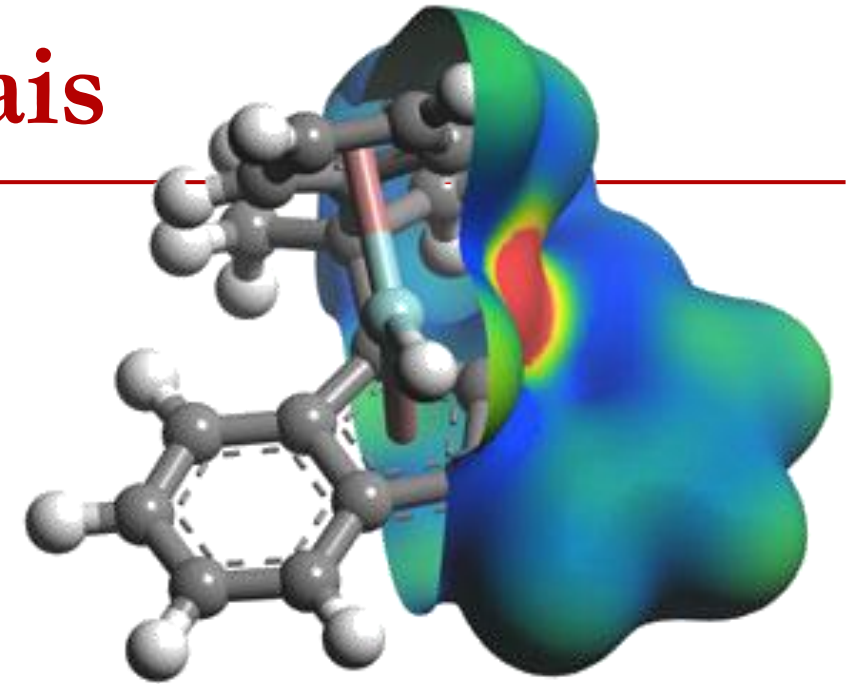
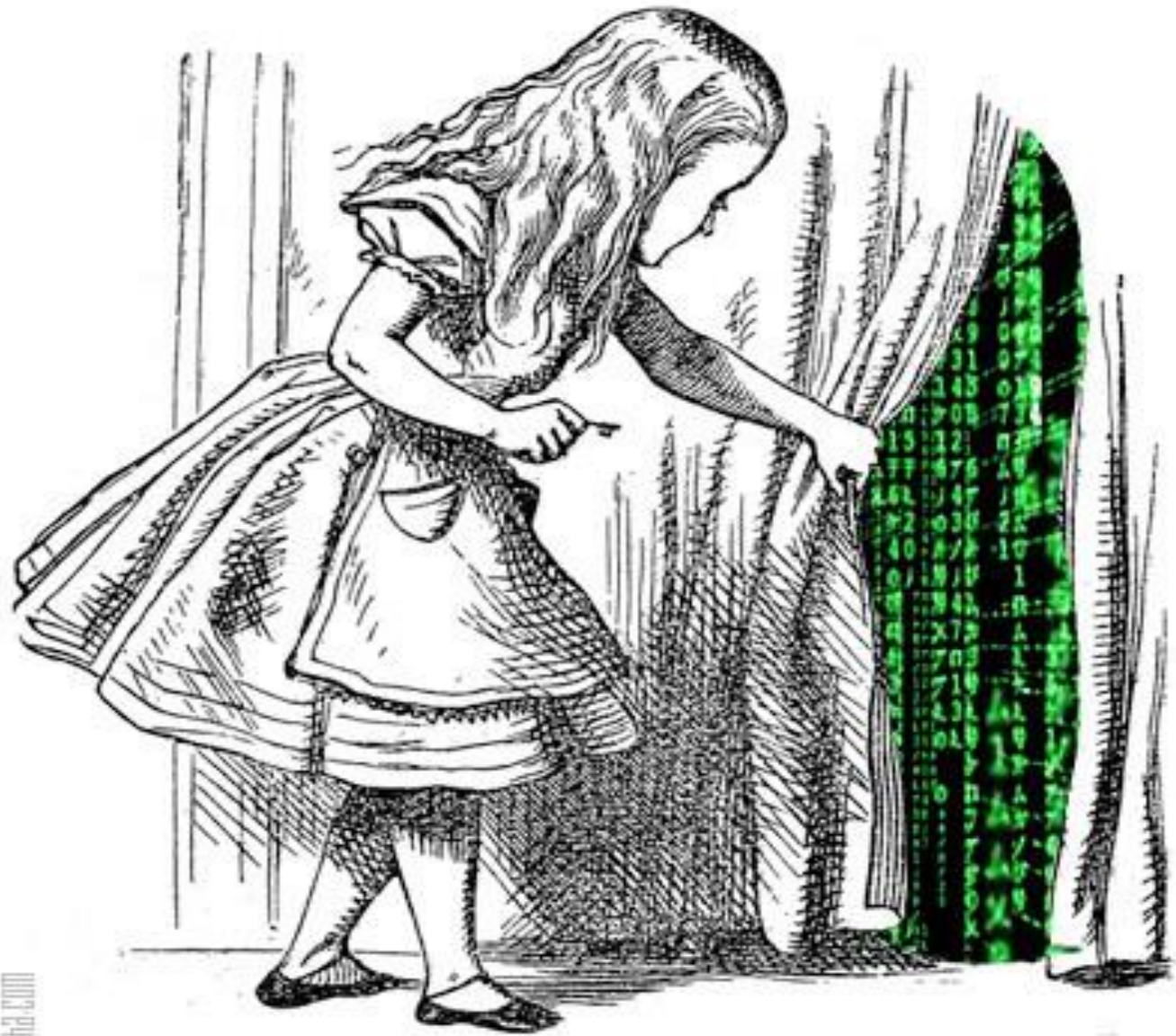
crmiranda@usp.br

AULA 3 – 27/08/2020

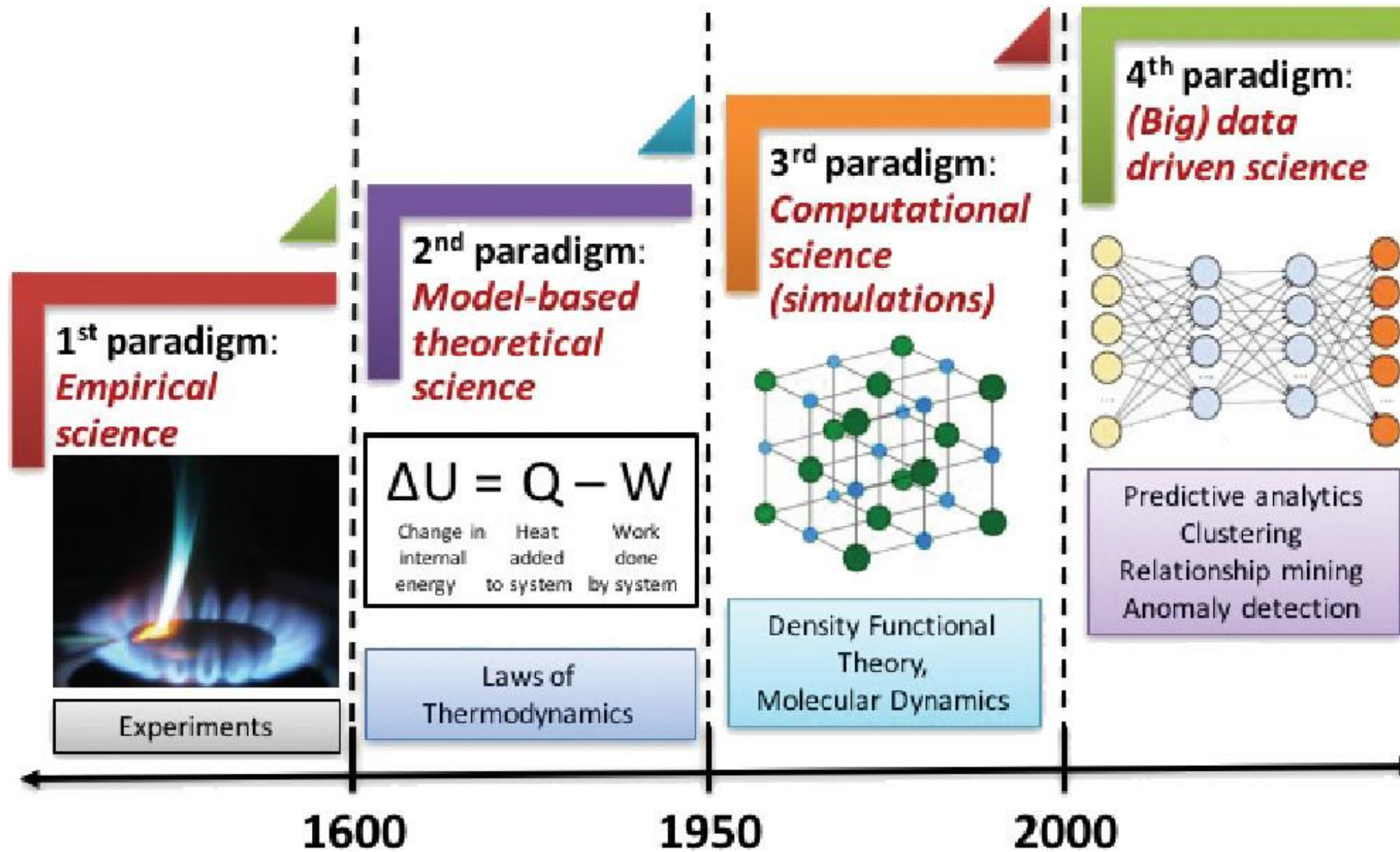
Parte A



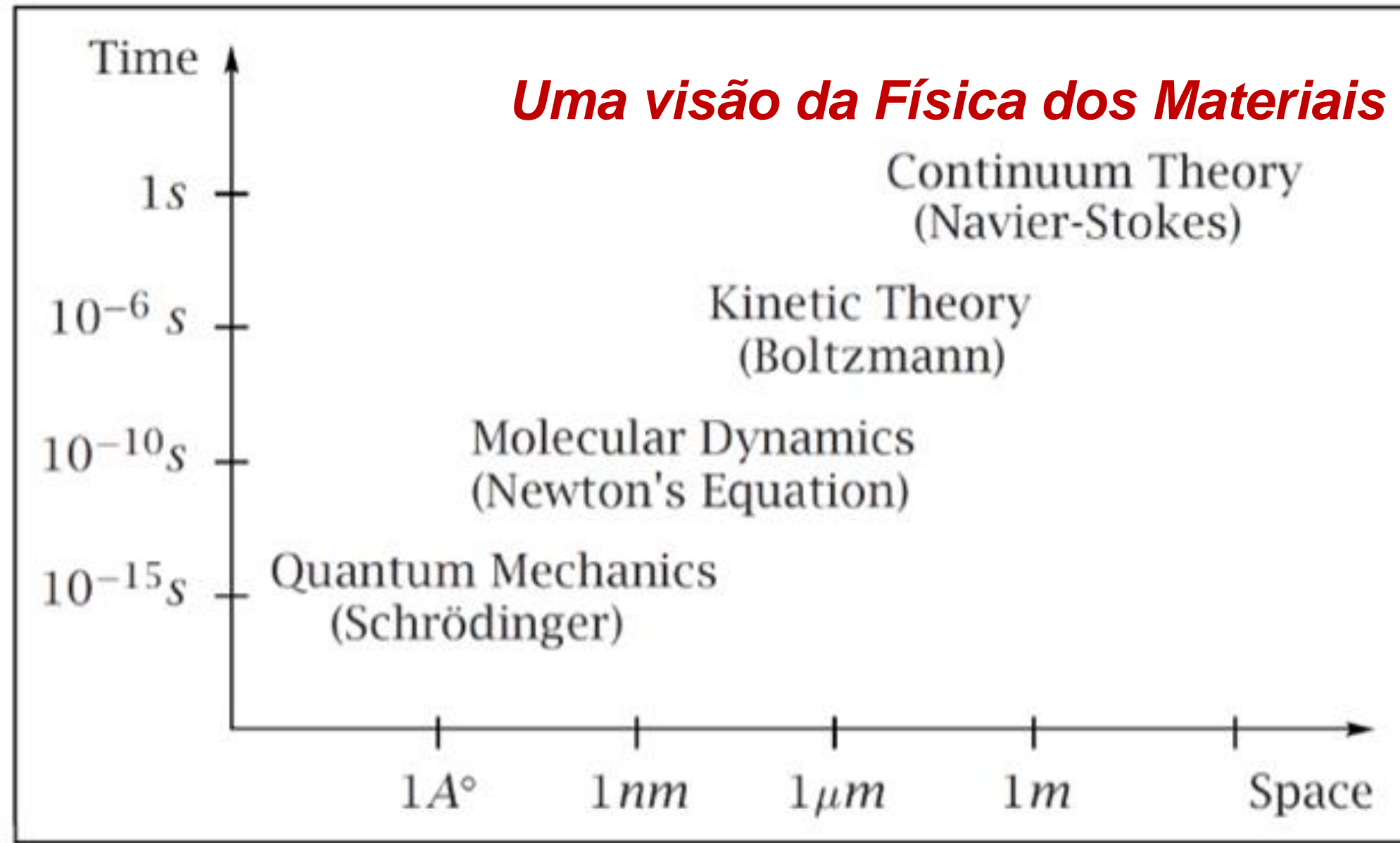
Simulação Computacional dos Materiais



Simulação tornou-se uma forma de experimentação em um universo de teorias – Gary Flake (The computational Beauty of Nature – MIT press)

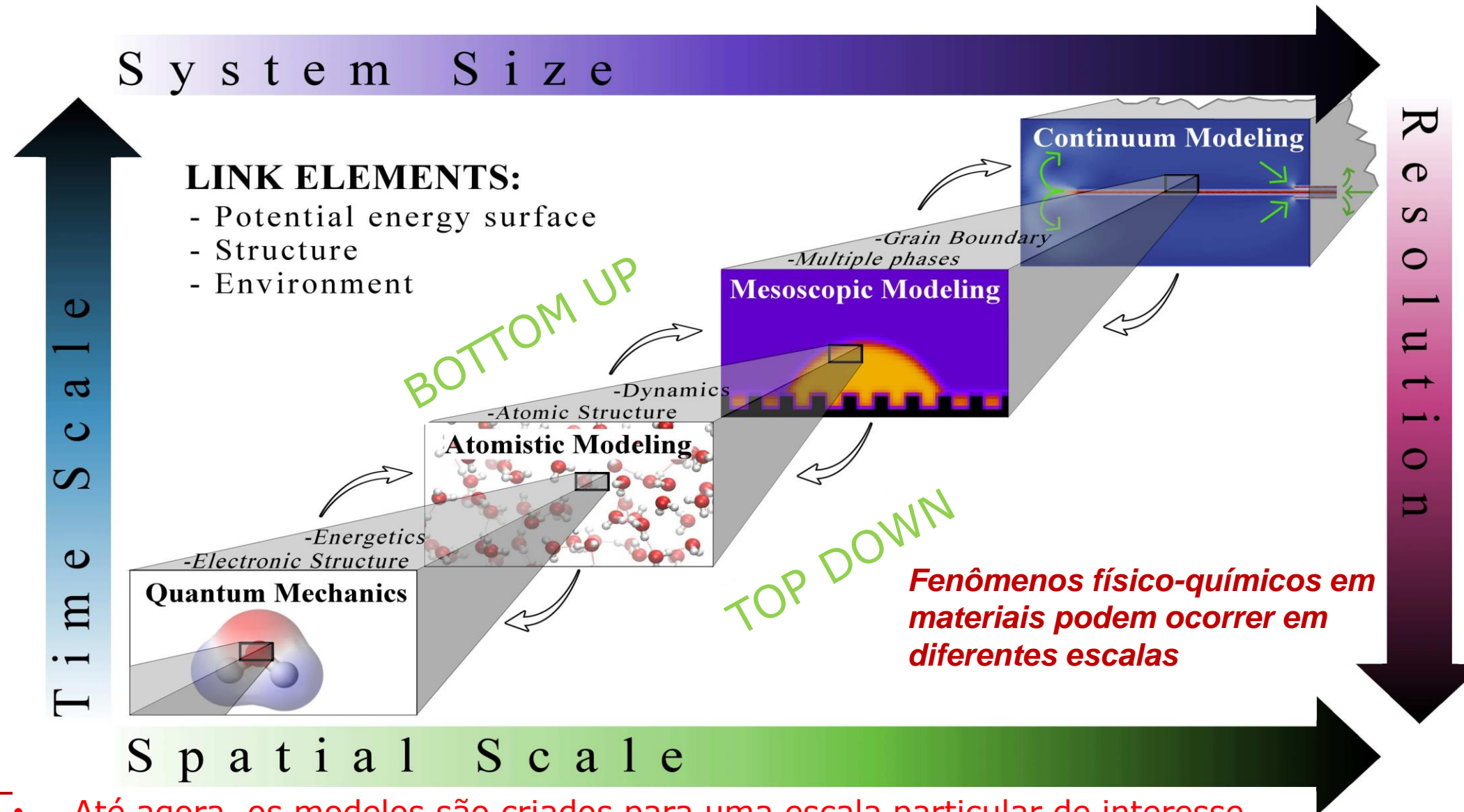


Multiescala nas leis da Física



Abordagem em multiescala

Desafio: modelar fenômenos físicos que variam de escalas moleculares a micro e macro.



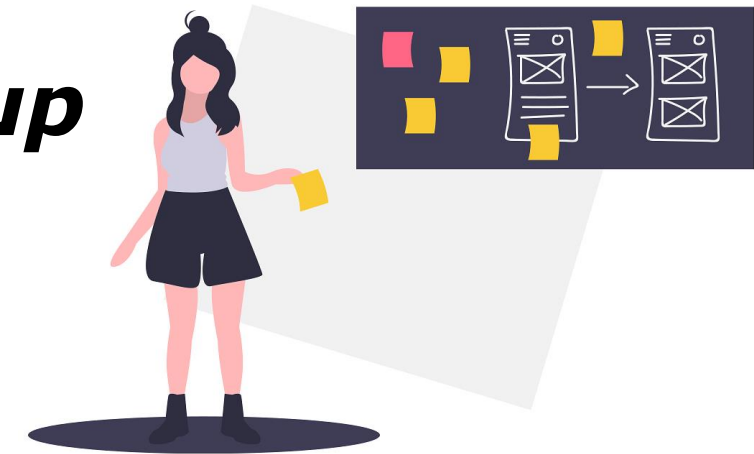
- Até agora, os modelos são criados para uma escala particular de interesse

Projeto Acadêmico ou Empreendedorismo ?

Projeto Científico



Start-up



Projetos

Áreas prioritárias de pesquisa definidas pelo MCTI para o período 2020-2023

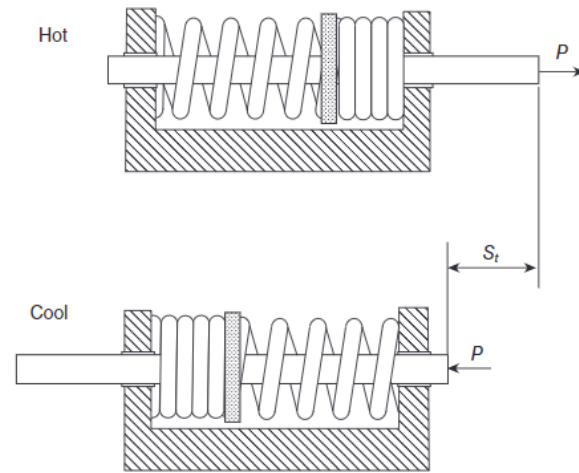
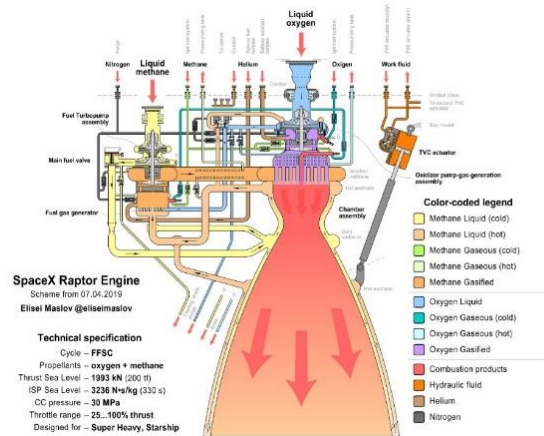
Tecnologias Estratégicas	Tecnologias Habilitadoras	Tecnologias de Produção	Tecnologias para o Desenvolvimento Sustentável	Tecnologias para Qualidade de Vida
• Espacial	• Inteligência Artificial	• Indústria	• Cidades inteligentes	• Saúde
• Nuclear	• Internet das coisas	• Agronegócio	• Energias renováveis	• 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	

P1 - Shape memory alloys (Nb-Ti-Al)

Motivação:

- ✓ Materiais com grande resistência térmica e mecânica
- ✓ Após deformação, peça retorna à estrutura original quando aquecida (*shape memory alloy*).

Aeroespacial: turbinas resistentes a temperatura e stress mecânico
 Aeroespacial: junções com diferente maleabilidade em função de T
 Bio-Robótica: peças que atuam como tendões '*finger like movement*'



Objetivos:

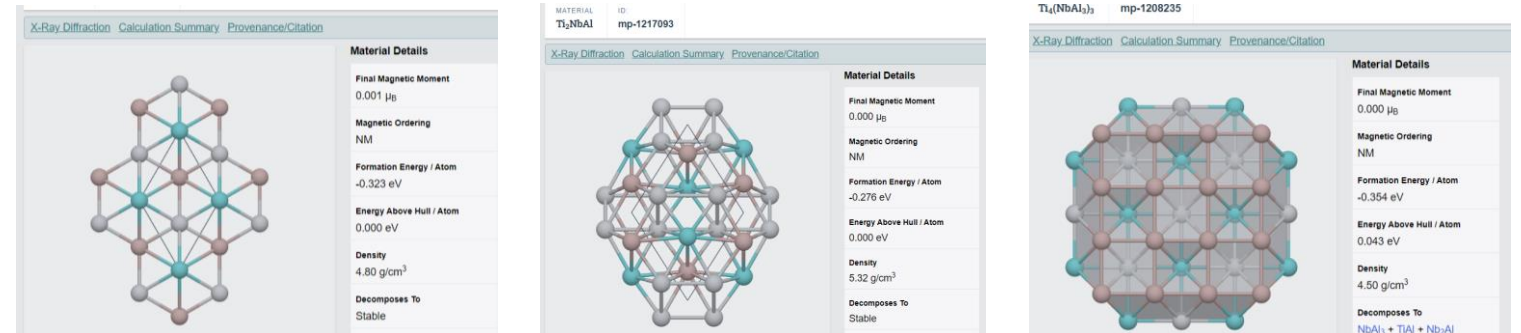
“Como esses três átomos interagem entre si???”

Obtenção de potenciais interatômicos Nb-Ti-Al.

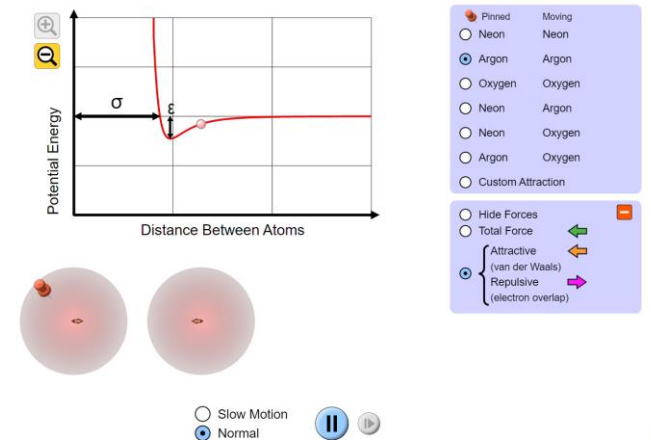
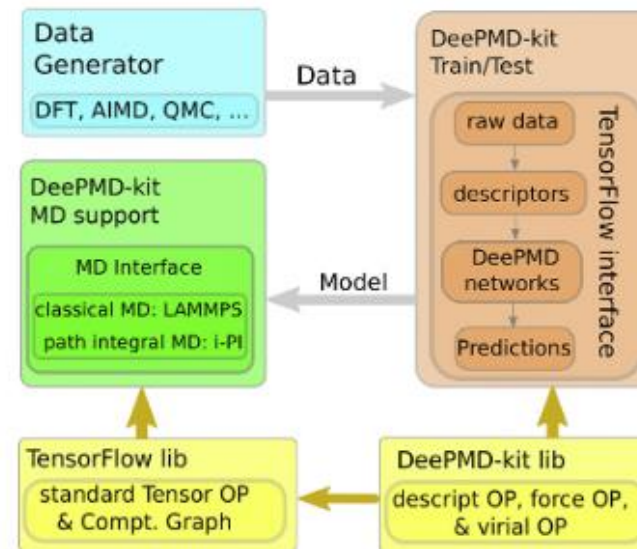
- ✓ Novas estruturas e composições para diversas aplicações.

Metodologia:

- ✓ Primeira parte: Obter parâmetros de convergência e estrutura de *bulk* com cálculos de primeiros princípios.



- ✓ Segunda parte: Obter potencial de interação com ML³

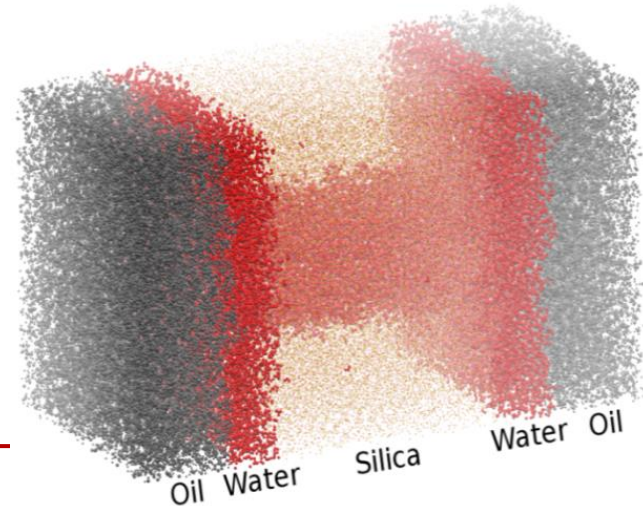
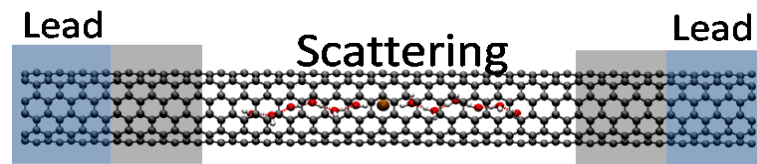
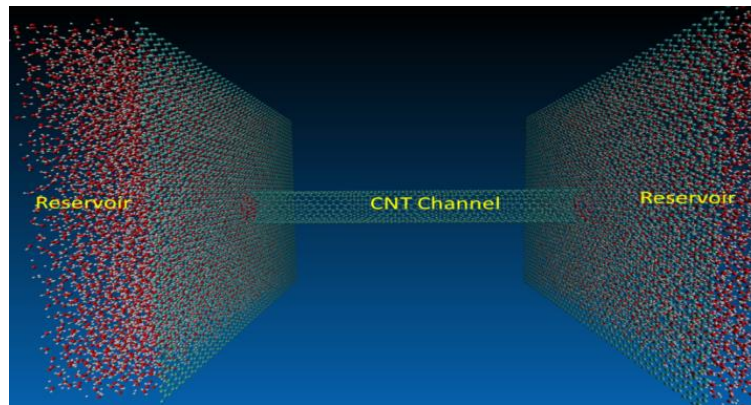


Atomic Interactions

Exemplo de potencial interatômico binário em um gás. Vamos desenvolver esse potencial para o sistema ternário em um sólido cristalino

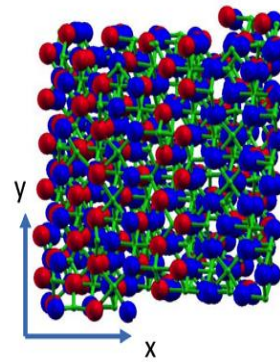
P2 - Materiais sob condições extremas

Nanofluidics (fundamentals to devices)

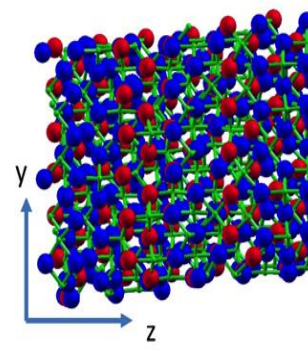


Atomistic pathways of pressure-induced densification of materials

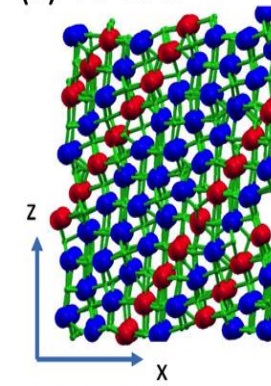
(a) 40 GPa



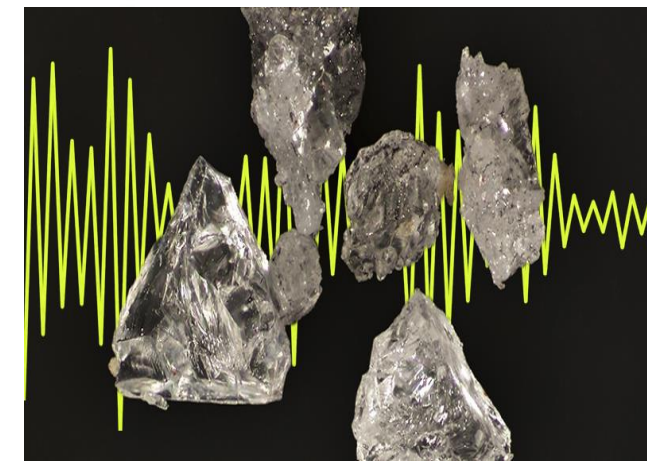
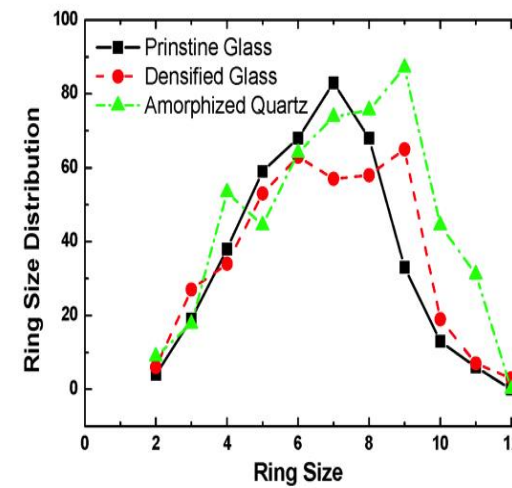
(b) 40 GPa



(c) 40 GPa



(e) 0GPa



Phys. Rev. B **92**, 134102 (2015)

PNAS (2017) Liu, Wu, Liang, Liu, Miranda, Scandolo

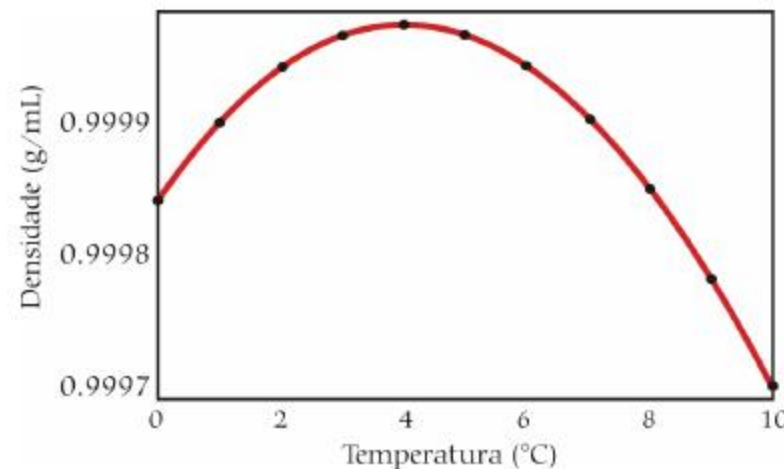
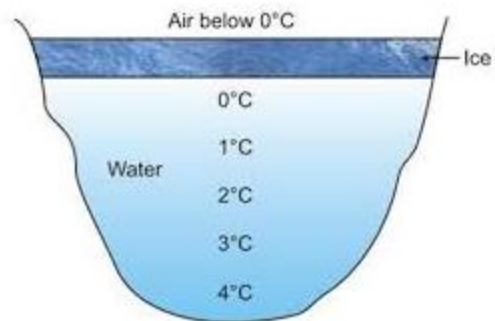
Scientific Reports (2016)

P3 - Modelo efetivo para investigar as anomalias da água

ESTUDO DAS “ESQUISITICES” DA ÁGUA

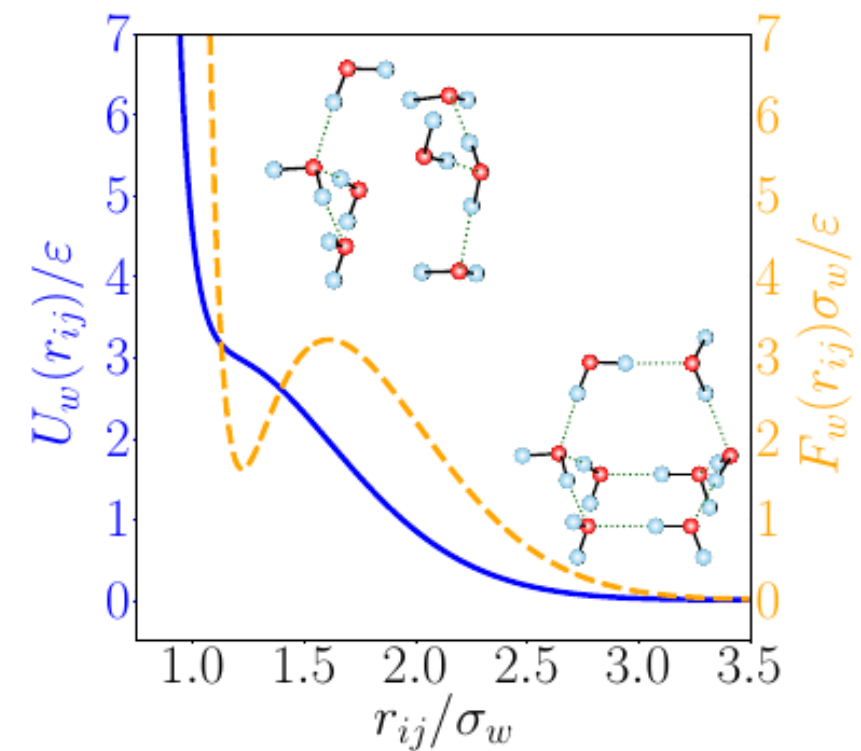
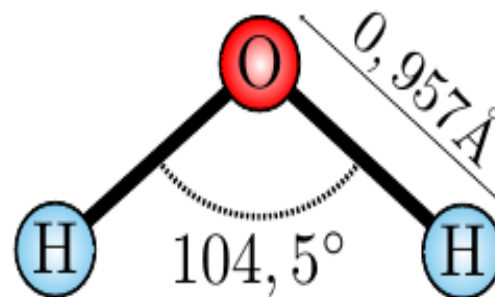
Modelo de Duas Escalas

Anomalia da Densidade



$$\frac{U_w(r_{ij})}{\epsilon} = 4 \left[\left(\frac{\sigma_w}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_w}{r_{ij}} \right)^6 \right] + u_0 \exp \left[-\frac{1}{c_0^2} \left(\frac{r_{ij} - r_0}{\sigma_w} \right)^2 \right]$$

- Investigar o diagrama de fases
- Anomalia na densidade
- Anomalia na difusão
- Propriedades estruturais



Projetos

Áreas prioritárias de pesquisa definidas pelo MCTI para o período 2020-2023				
Tecnologias Estratégicas	Tecnologias Habilitadoras	Tecnologias de Produção	Tecnologias para o Desenvolvimento Sustentável	Tecnologias para Qualidade de Vida
• 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	

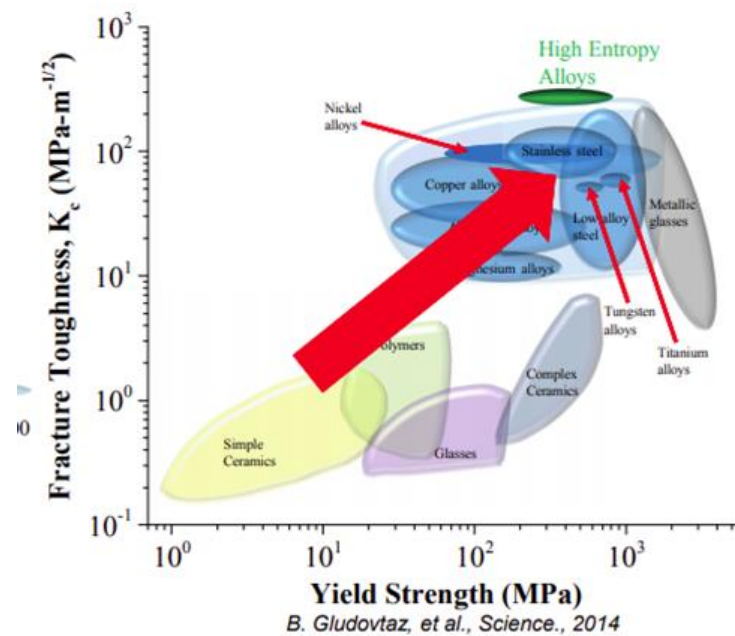
P4 - Descoberta de ligas resistentes a temperatura por aprendizado de máquina

Motivação

- Ligas refratárias são essenciais para os setores de energia, eng. aeronáutica e aeroespacial.
- Descoberta de novos materiais;
- Estudo de propriedades físicas;
- Contato com técnicas de machine learning.

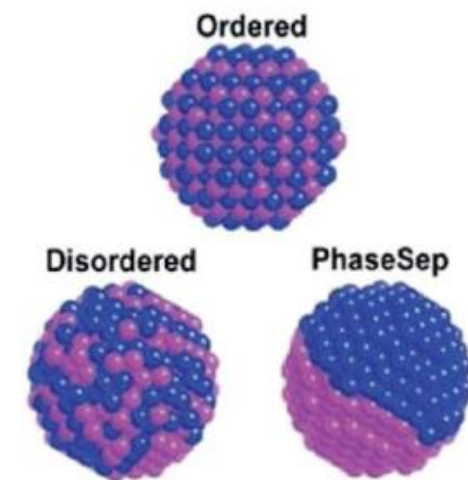
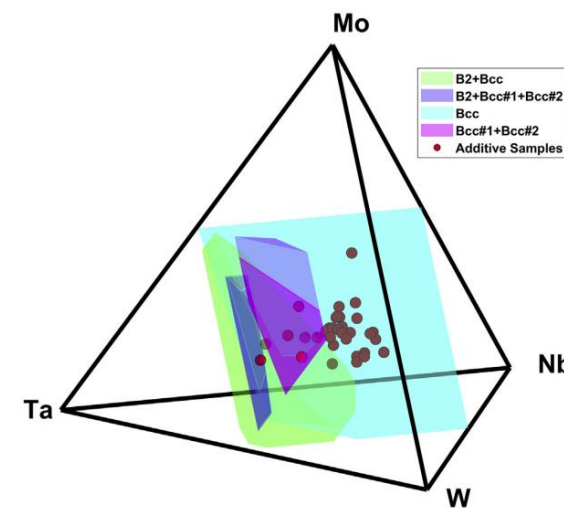


SpaceX Falcon Heavy®, 2018



Objetivos

- ✓ Modelar as propriedades elásticas de materiais metálicos com técnicas de AM.
- ✓ Contato com modelos de regressão como árvores de decisão e redes neurais artificiais.
- ✓ Identificar parâmetros físicos essenciais para os modelos.
- ✓ Apresentar uma comparação entre os diferentes modelos e as melhores ligas candidatas.



Gwalani et al., Materials Today Comm. 20 (2019)

P5 - Aplicação de nanoestruturas de ouro como sensor molecular

Motivação: Nanopartículas de ouro possuem propriedades físicas e químicas que permitem aplicação como sensores químicos e biológicos.

Objetivos:

Geral: utilizar métodos de modelagem molecular (primeiros princípios, teoria do funcional da densidade) para estudar a variação de propriedades estruturais e eletrônicas em modelos de superfície de ouro;

Específico: determinar para quais moléculas as variações são mais significativas, possibilitando o uso como sensor.

Exemplos de moléculas a serem consideradas: H_2 , N_2 , O_2 , H_2O , CO , CO_2 , NH_3 , CH_3 , benzeno, etc.

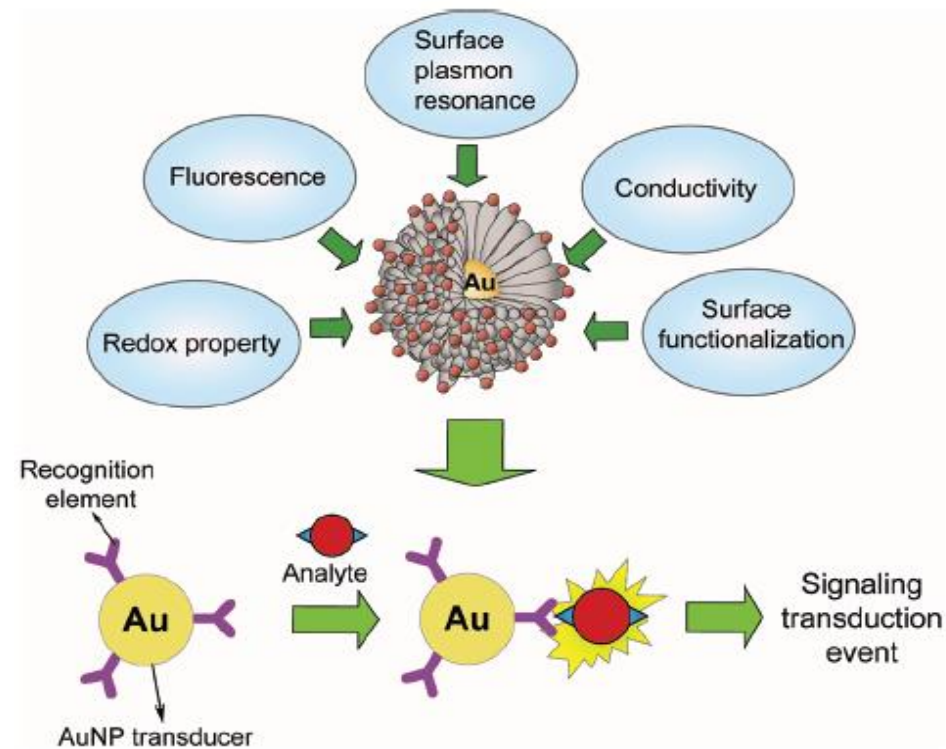


Figure 1. Physical properties of AuNPs and schematic illustration of a AuNP-based detection system.

Referência e origem da Figura: Saha, K. et al.; Chem. Rev. 2012, 112, 2739–2779

P6 - Nanociência aplicada à ciência dos alimentos

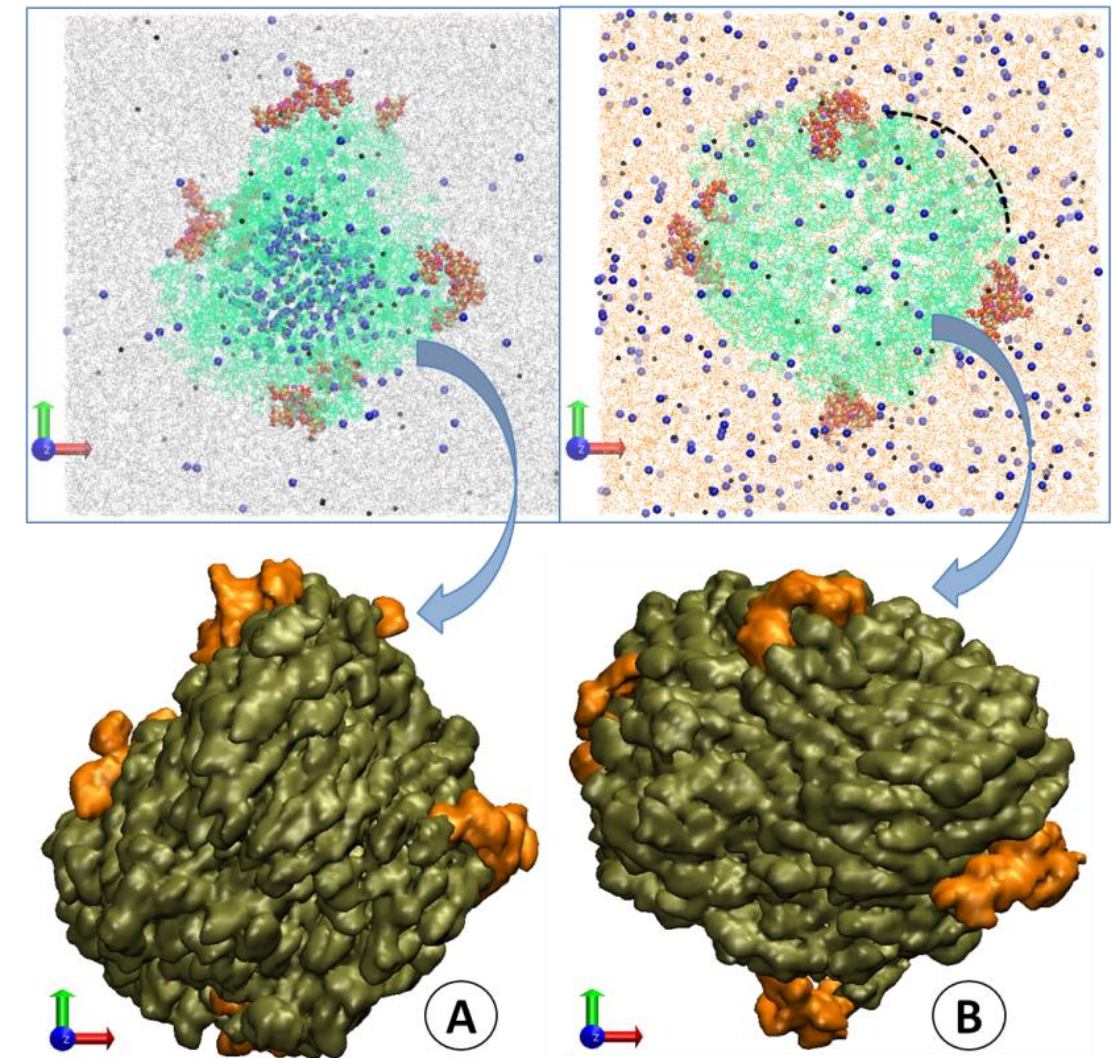
Ferran Adrià - *El Bulli* - Liquids (caviar)

Sodium Alginate

Types:

Direct (Alginate ($\text{NaC}_6\text{H}_7\text{O}_6$) + CaCl_2 bath)

Inverse (Glucolactate $\text{C}_9\text{H}_{16}\text{CaO}_{10}$ + Alginate bath)



Mapas volumétricos da Esf. Inversa (A) e Esf. Direta (B).

Projetos

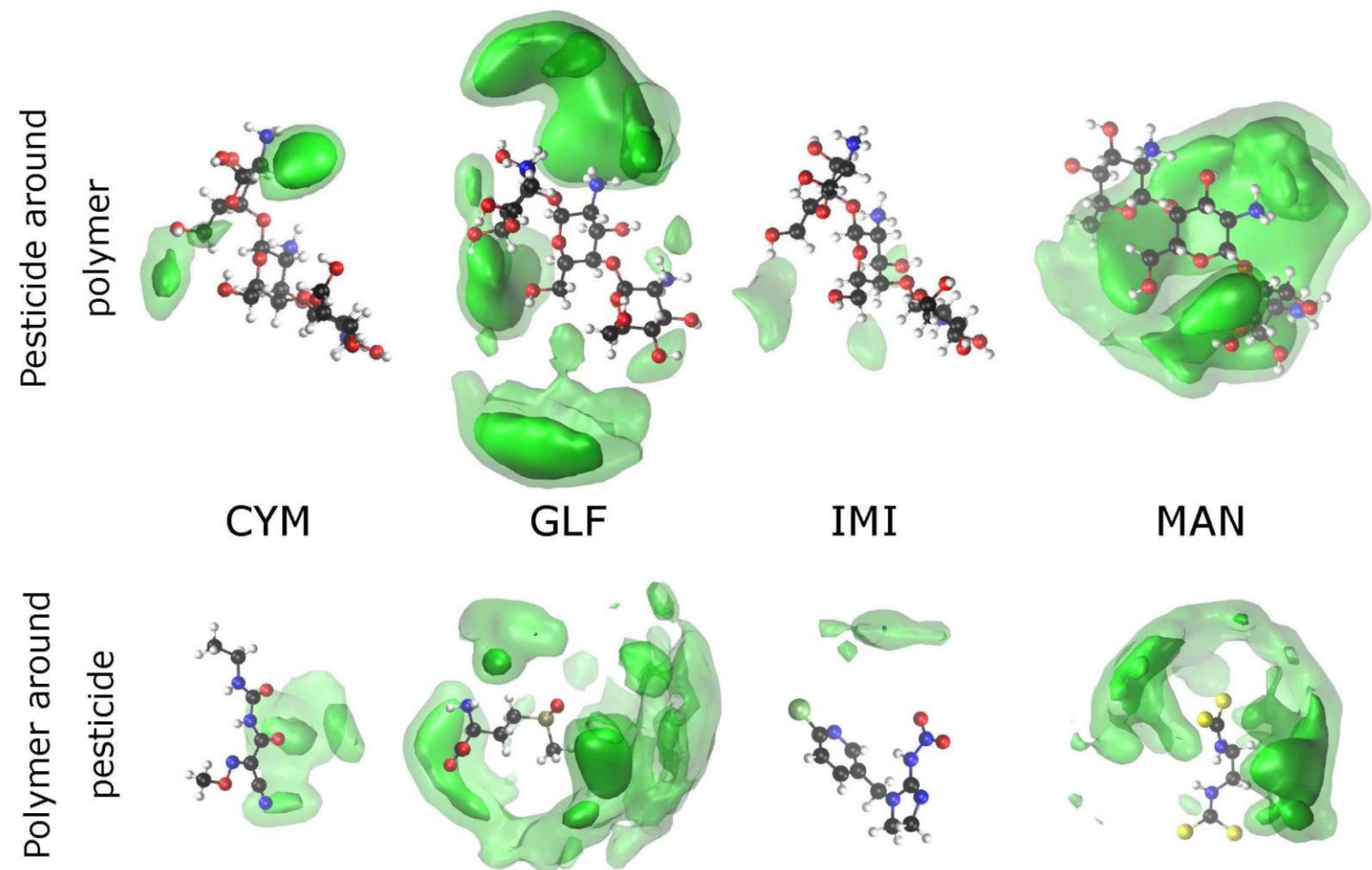
Áreas prioritárias de pesquisa definidas pelo MCTI para o período 2020-2023				
Tecnologias Estratégicas	Tecnologias Habilitadoras	Tecnologias de Produção	Tecnologias para o Desenvolvimento Sustentável	Tecnologias para Qualidade de Vida
• Espacial	• Inteligência Artificial	• Indústria	• Cidades inteligentes	• 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	

P7 - Adsorção de fertilizantes / agrotóxicos em superfícies

Adsorção de fertilizantes e/ou agrotóxicos em superfícies que compõem solos

Propriedades eletrônicas e estruturais

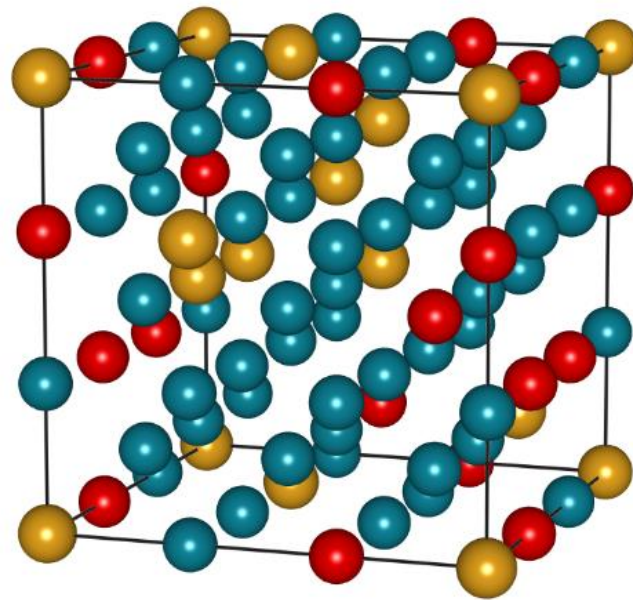
Seletividade / bioacumulaçã



P8 - Simulação do aço via primeiros princípios

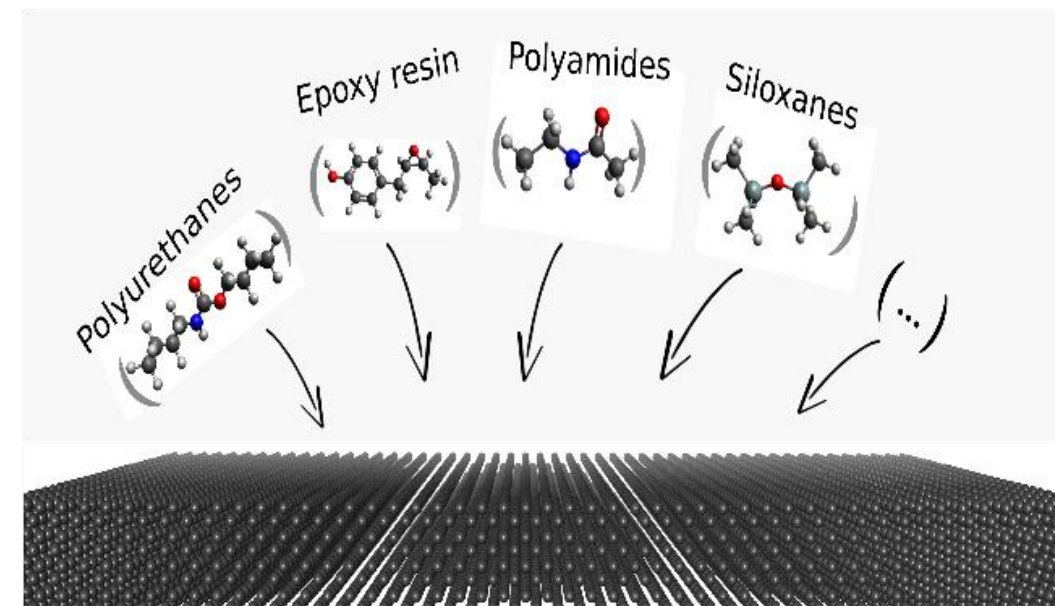
Motivação

- Aço é um dos principais materiais
- Desenvolver aços com melhor resposta mecânica e à corrosão.
- Aços especiais para condições extremas



Objetivos

- Simular o aço via primeiros princípios
- Determinar as propriedades mecânicas e a interação de camadas protetoras à corrosão.

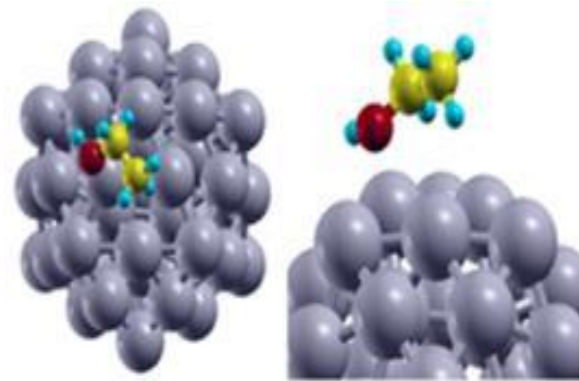
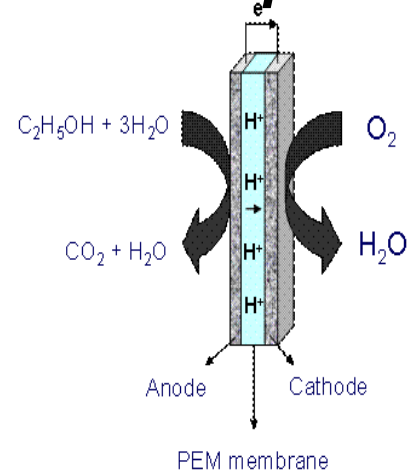


P9 - Materiais nanoestruturados para aplicações de energia e infraestrutura

Materiais para armazenamento de energia e conversão

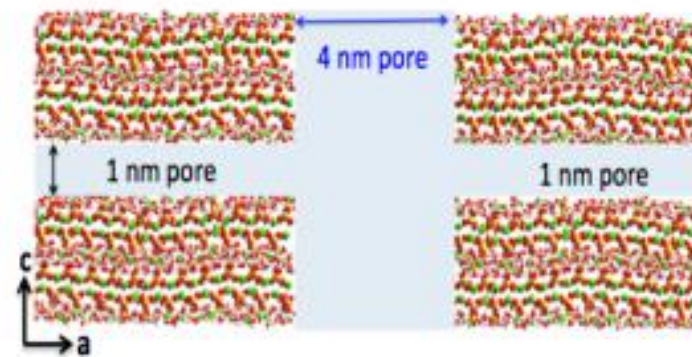
Água e CO₂ no cimento

Molhabilidade em dispositivos eletroquímicos

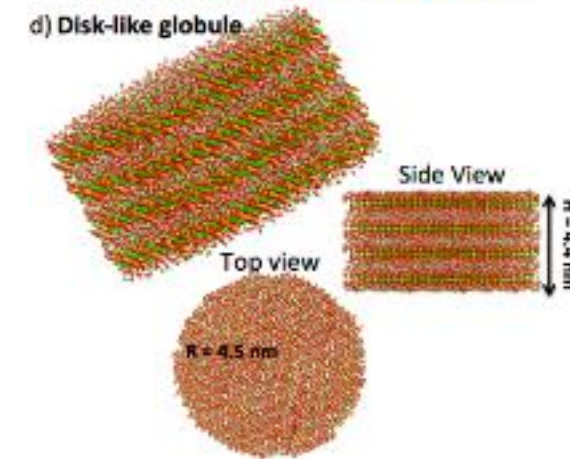


Ethanol catalysis @ NPs

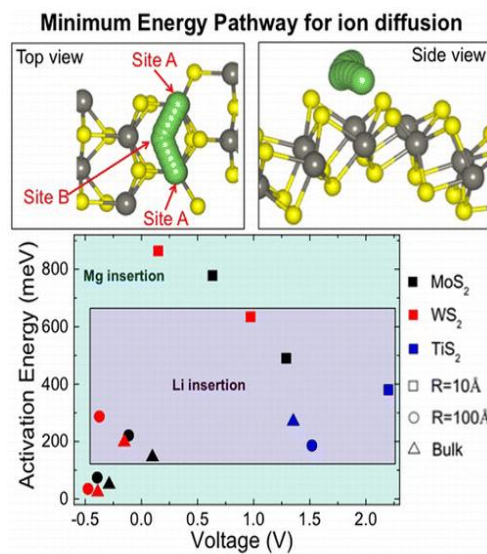
c) Connected Pore



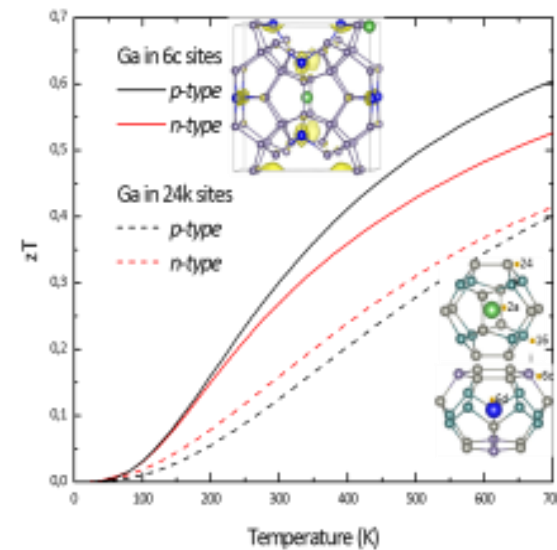
Particulate nature of C-S-H



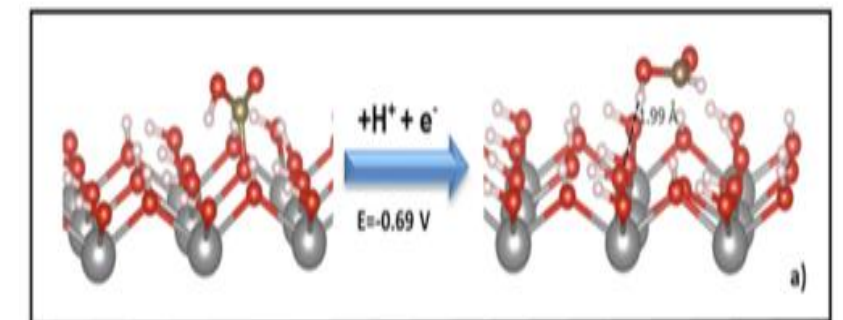
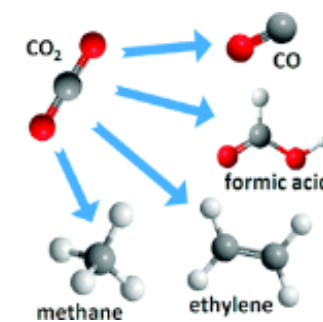
Direct alcohols fuel cells



Thermoelectrics



Conversão de CO₂ em matéria-prima



Batteries

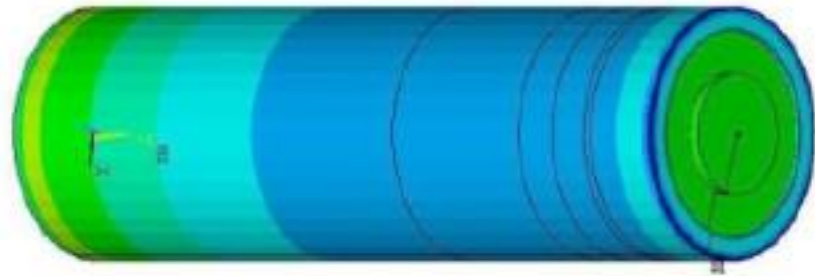
Projetos

Áreas prioritárias de pesquisa definidas pelo MCTI para o período 2020-2023				
Tecnologias Estratégicas	Tecnologias Habilitadoras	Tecnologias de Produção	Tecnologias para o Desenvolvimento Sustentável	Tecnologias para Qualidade de Vida
• 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	

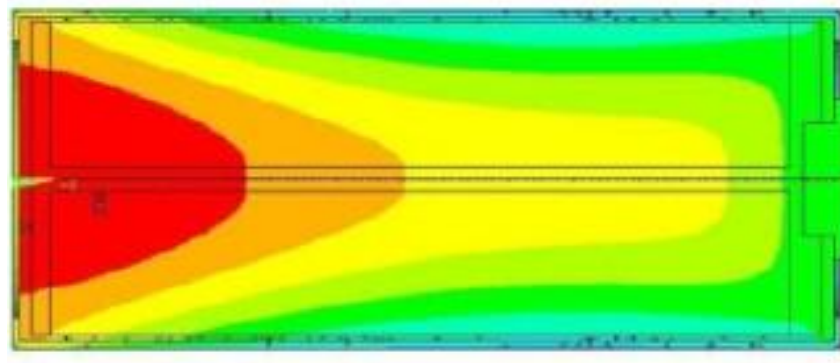
P10 - Distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li

Motivação

- As baterias de íon-lítio são amplamente estudadas devido a alta densidade de energia.
- Seu desempenho depende das condições térmicas e da uniformidade do gradiente de temperatura interno.



Distribuição de temperatura na superfície da bateria.



Gradiente de temperatura no interior da bateria.

Objetivo geral

Analisar o regime do estado estacionário da distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li.

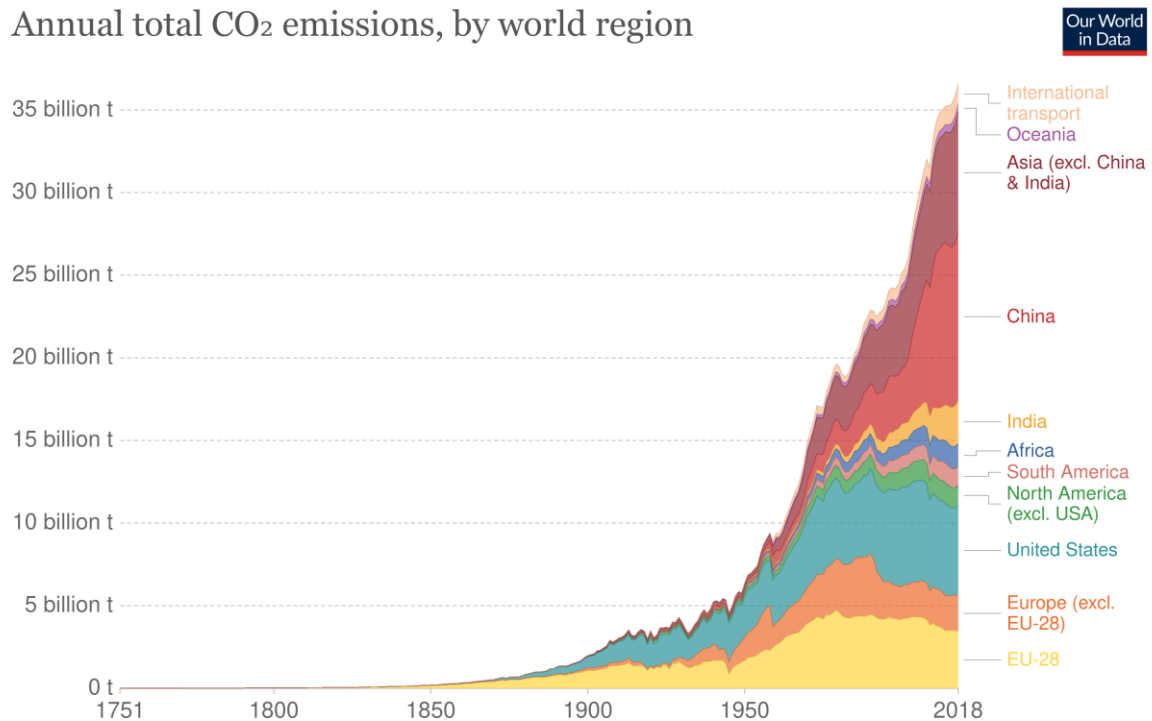
Objetivo específicos

- Implementar um modelo (elementos finitos) de distribuição térmica para uma bateria cilíndrica.
- Considerar a estrutura física e as reações eletroquímicas.
- Determinar as condições iniciais, condições de contorno e parâmetros térmicos dos componentes da bateria a partir de cálculos teóricos e/ou simulações moleculares.

P11 - Adsorção de gases estufa em materiais porosos

Motivação

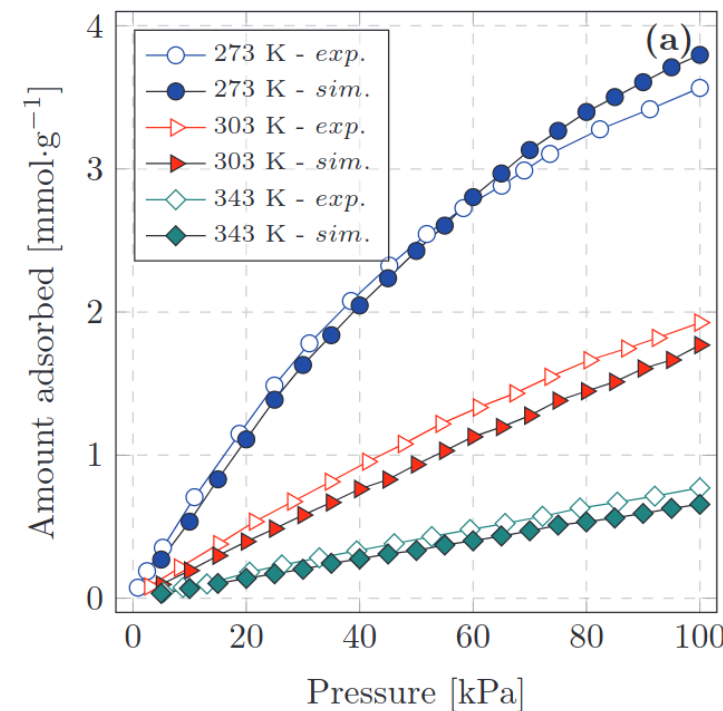
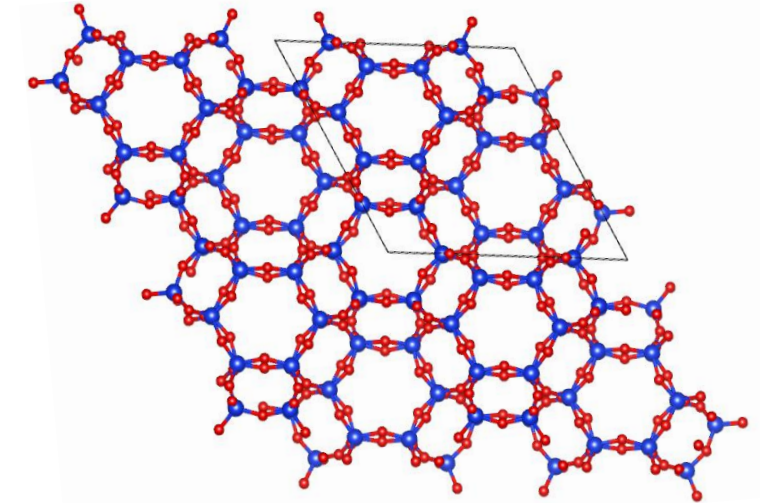
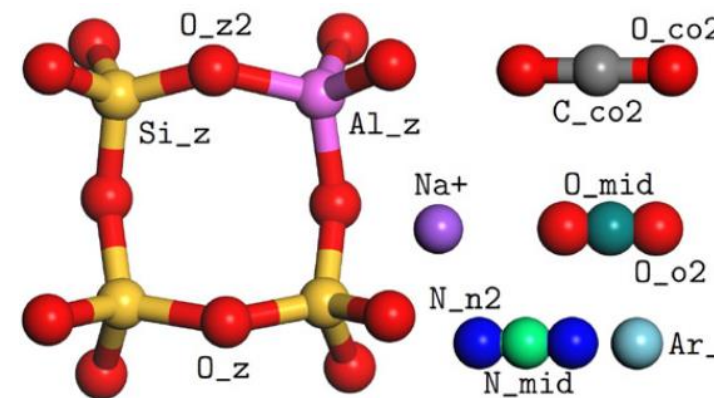
Annual total CO₂ emissions, by world region



Source: Carbon Dioxide Information Analysis Center (CDIAC); Global Carbon Project (GCP)
Note: 'Statistical differences' included in the GCP dataset is not included here.
OurWorldInData.org/co2-and-other-greenhouse-gas-emissions • CC BY

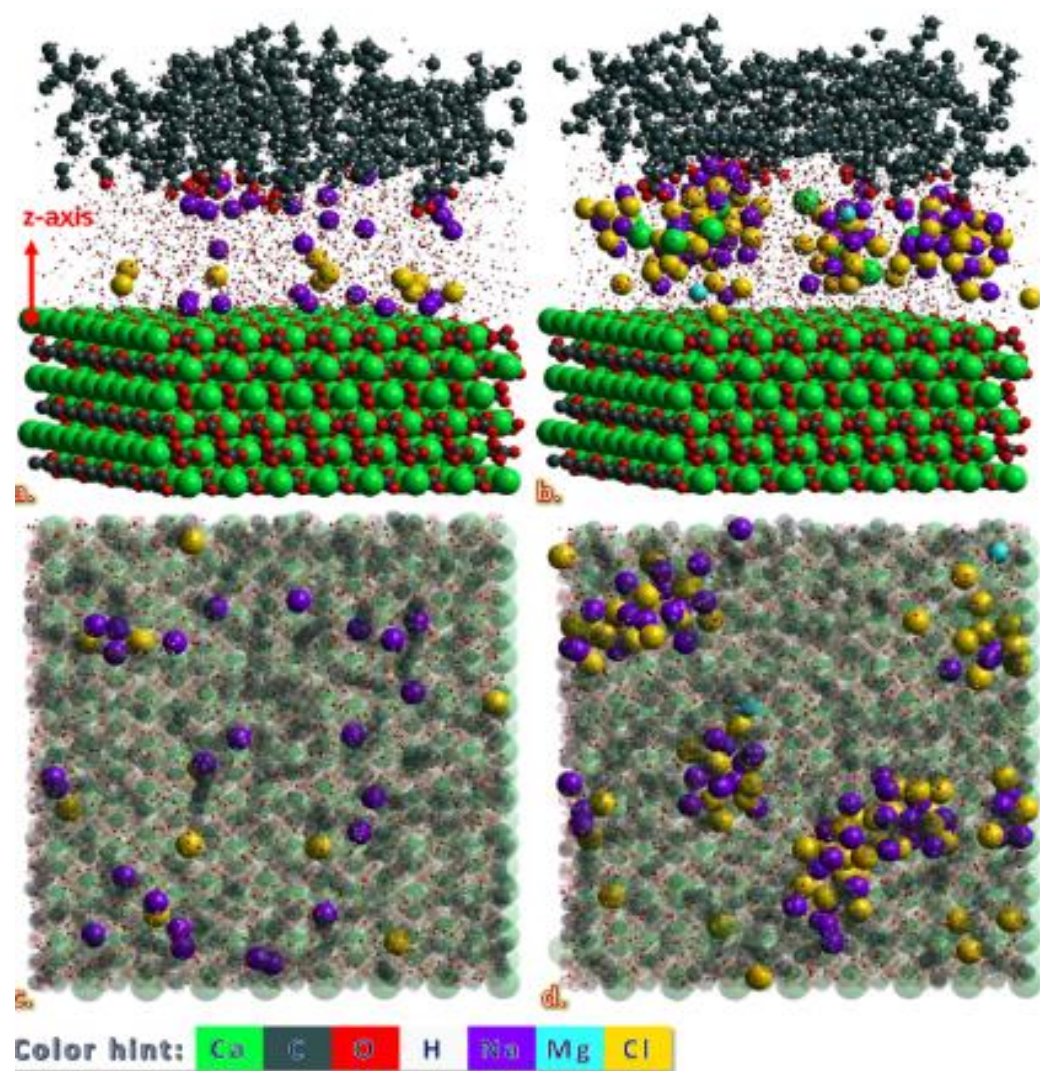
- Reduzir as emissões de CO₂ de uma maneira economicamente viável é um desafio
- Mesmo com as reduções previstas nos acordos internacionais, precisaríamos reduzir as emissões ainda mais
- Uma alternativa é tentar remover o CO₂ da atmosfera, através de um processo chamado de captura de CO₂

Captura de CO₂ com Zeólitas e MOFs

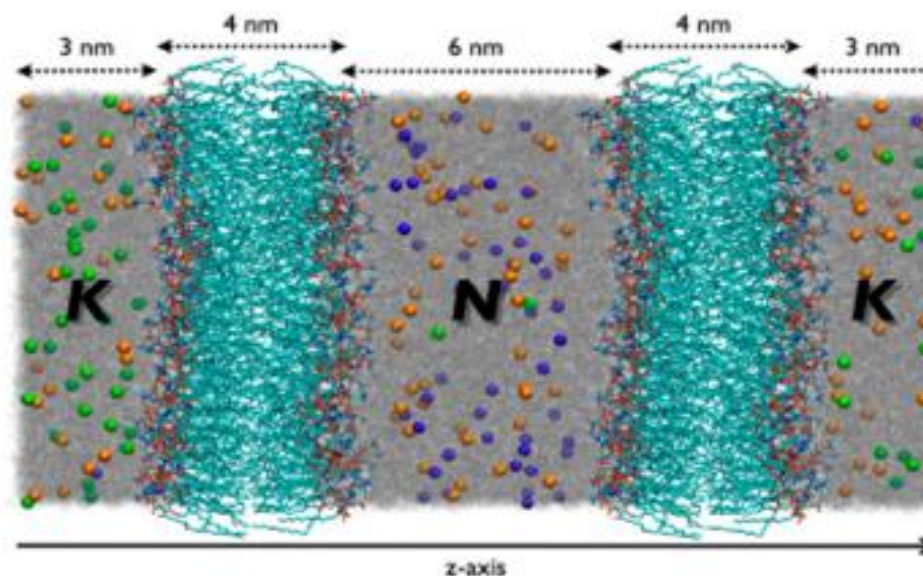


- Uma classe de materiais que é estudada para capturar CO₂ são as zeólitas e MOFs.
- A simulação computacional desses materiais é importante pois permite estudar as interações entre o gás e o sólido para desenvolver novos materiais, e também prever a capacidade de armazenamento pelas estruturas.
- Neste projeto, estudaremos a capacidade de carga de CO₂ por zeólitas e também a mobilidade das moléculas no interior do material.
- Utilizaremos Grand Canonical Monte Carlo para simular as isotermas de adsorção (figura ao lado) e dinâmica molecular para investigar a difusão do gás dentro do material.

P12 - Dinâmica Molecular de interfaces em água



Eletroquímica: interface água-eletrodo
Geoquímica: interface mineral-água
Química ambiental: interface água-gases
Membrana celular: interface água-lípideos



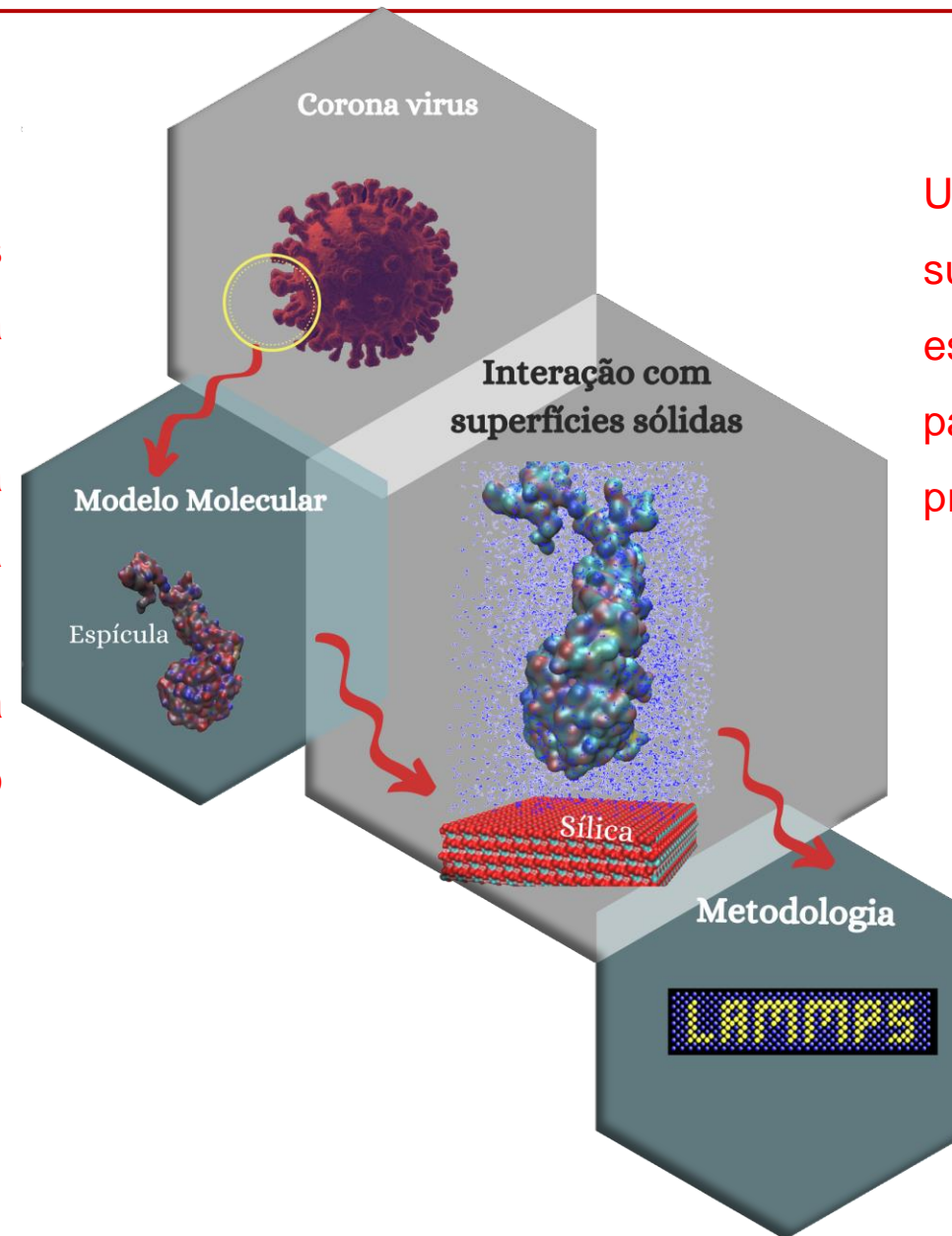
Projetos

Áreas prioritárias de pesquisa definidas pelo MCTI para o período 2020-2023				
Tecnologias Estratégicas	Tecnologias Habilitadoras	Tecnologias de Produção	Tecnologias para o Desenvolvimento Sustentável	Tecnologias para Qualidade de Vida
• 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	

P13 - Simulações de dinâmica molecular da interação do corona vírus com superfícies sólidas

Motivação

Modelos científicos são ferramentas cruciais para antecipar, prever e responder a complexas crises biológicas, sociais, ambientais, incluindo pandemias. Dada a necessidade de uma resposta rápida à pandemia causada pelo novo coronavírus, as simulações computacionais de dinâmica molecular vêm se destacando como importante aliada no combate ao vírus.



Objetivo geral

Uma questão crítica é o tempo de vida do vírus na superfície de diferentes materiais. Nesse contexto, o estudo da interface do vírus com a superfície dos sólidos a partir de uma perspectiva molecular é essencial para propor novos medicamentos.

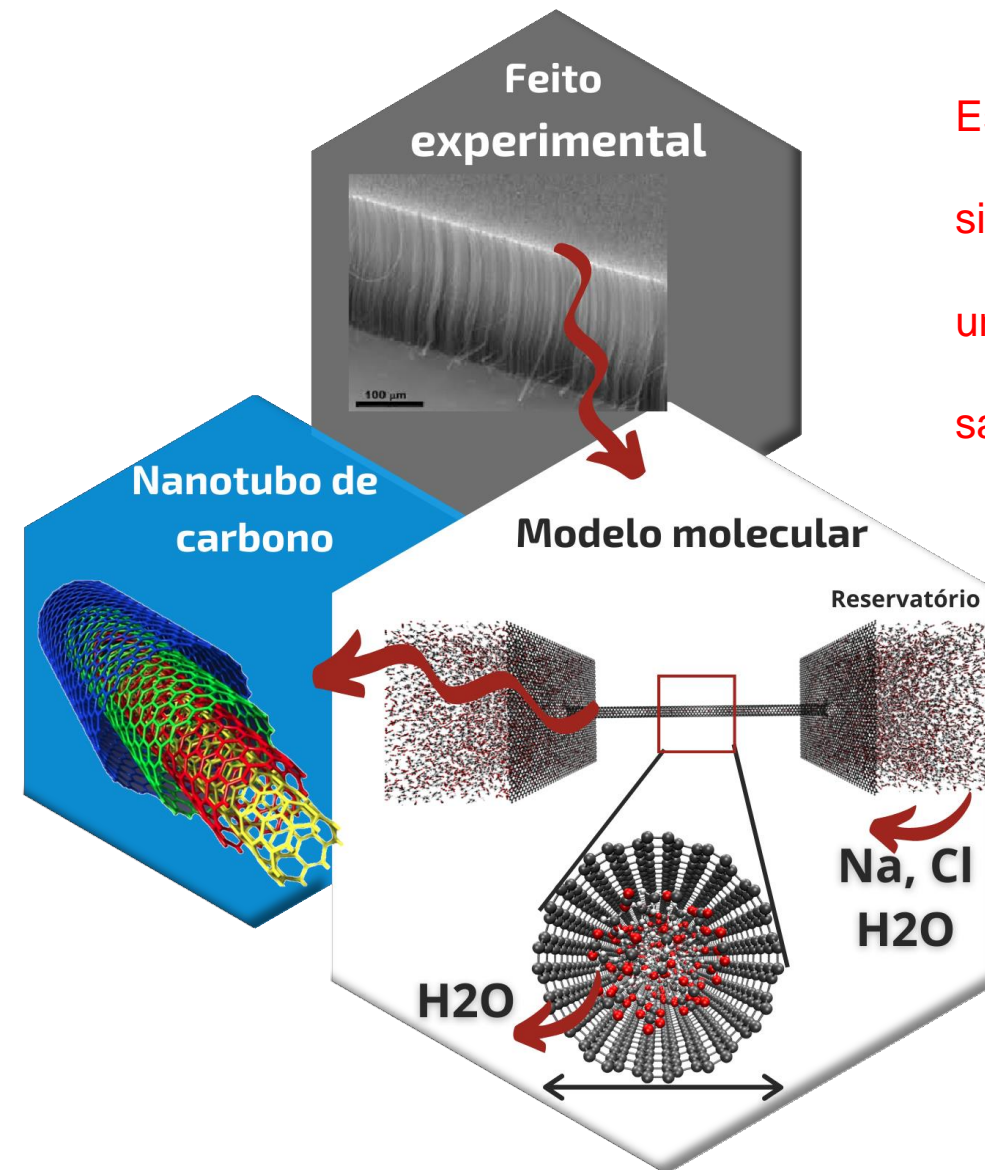
Objetivo específicos

O objetivo desse projeto é investigar a interação entre superfícies sólidas e a proteína "spike" S do coronavírus utilizando simulações de dinâmica molecular como implementado no código lammps. Com esse estudo buscamos um discernimento sobre o efeito da superfície sólida na adsorção e estabilidade da proteína responsável pelo acoplamento do vírus na célula humana.

P14 - Estudo de membranas a base de carbono para desalinização da água

Motivação

O conhecimento dos fenômenos que ocorrem no nível molecular pode conduzir à otimização do processo de desalinização da água em materiais a base de carbono



Objetivo geral

Essa proposta de projeto busca investigar através de simulações de dinâmica molecular um sistema formado por um nanotubo de carbono acoplado a um reservatório de salmoura.

Objetivo específicos

Para estudar os efeitos de confinamento espacial, consideraremos diferentes diâmetros de tubo na escala nanométrica e composições da salmoura. Por fim, vamos investigar a seletividade dos nanotubos para diferentes sais a fim de otimizar o design de membranas para desalinização.

P15 - Projeto De Uma Perna Protética Utilizando O Método dos Elementos Finitos

Motivação

- Próteses para alta performance esportiva;
- Designs inspirados nos modelos propostos pela Össur;
- <https://www.ossur.com.br/solucoes-proteticas/produtos/sport-solutions?view=products>
- Aplicação de novos materiais;
- Inclusão social;



Flex-Run - Össur



Cheetah Xtend - Össur

Objetivos

Aplicar o método de elementos finitos (MEF) usando o software Elmer para:

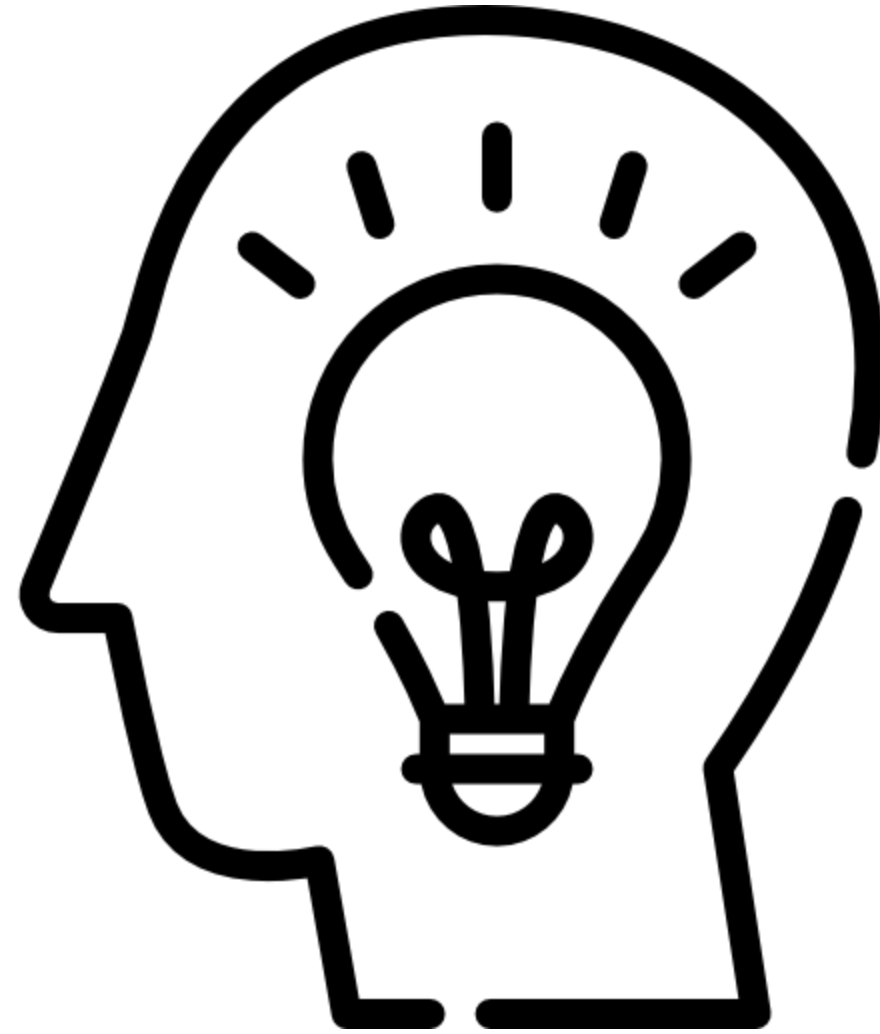
Objetivos Gerais:

- ✓ Realizar uma análise estática dos modelos de próteses propostos utilizando diferentes materiais, como por exemplo a liga Ti-35Nb-7Zr-5Ta, fibra de carbono, entre outros;

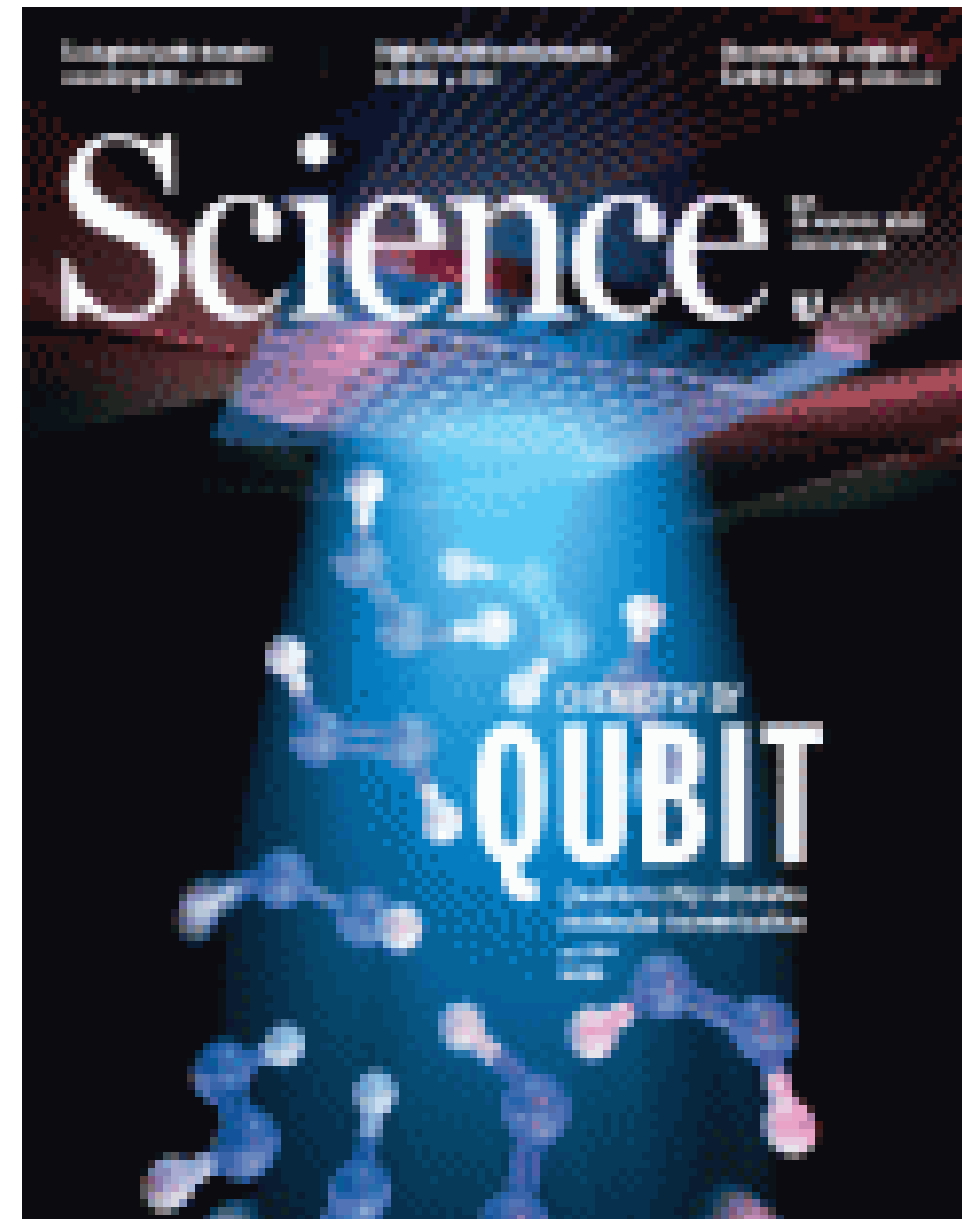
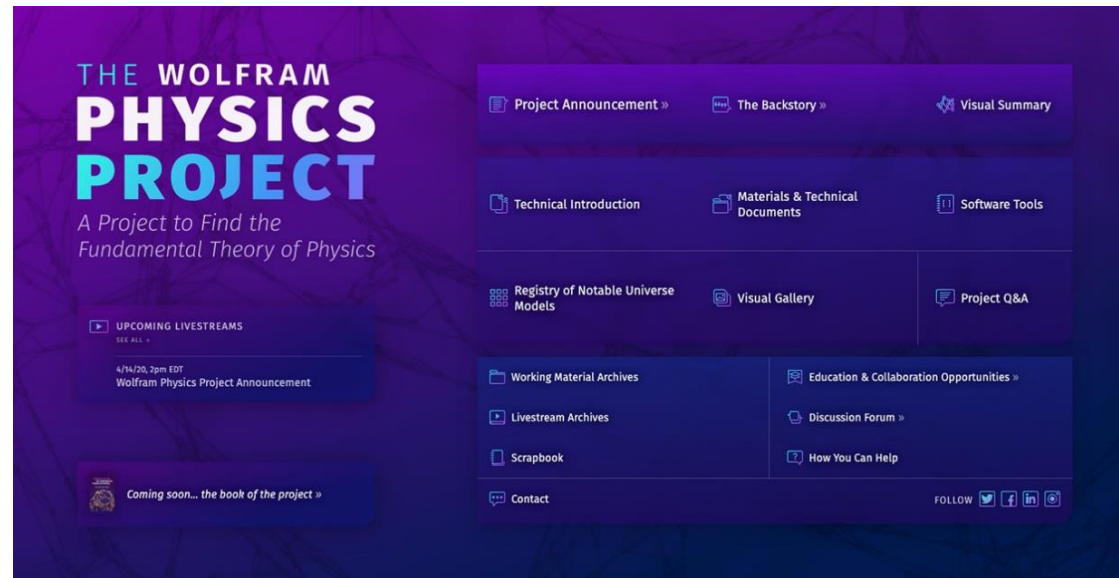
Objetivos específicos:

- ✓ Propor novos materiais/ligas que podem ser utilizadas para o desenvolvimento de próteses para alta performance esportiva;
- ✓ Apresentar resultados em termos de tensões, deslocamentos, frequências naturais, peso da prótese, custo estimado, vantagens e desvantagens entre os diferentes materiais, aplicabilidade, e comparações com modelos já estudados;
- ✓ Comparar os resultados para os diferentes modelos (geometrias) de próteses que serão fornecidos;

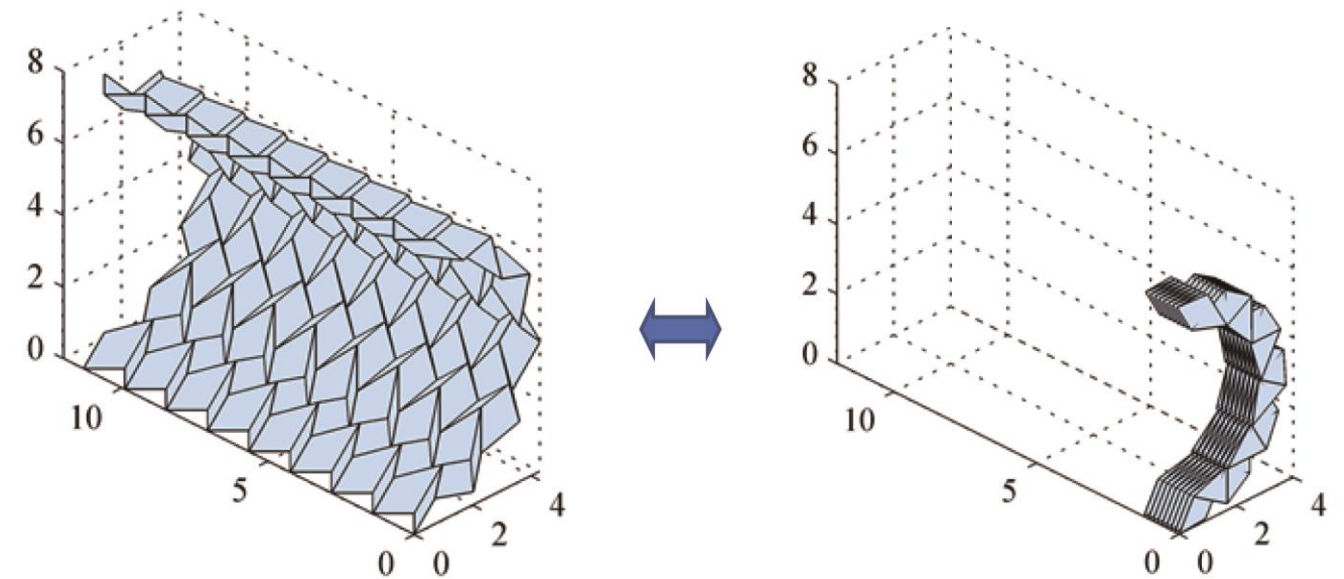
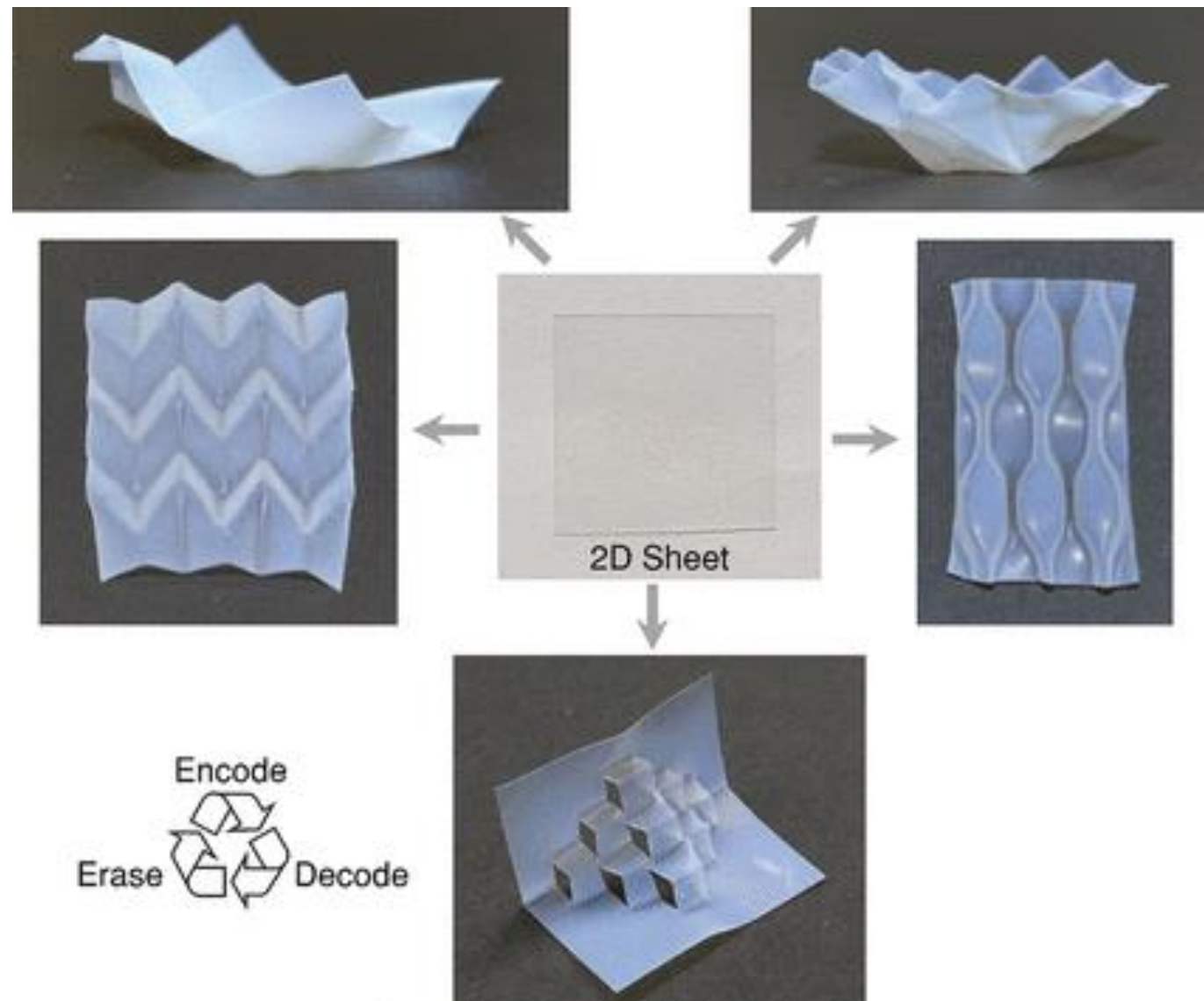
Outras ideias ?



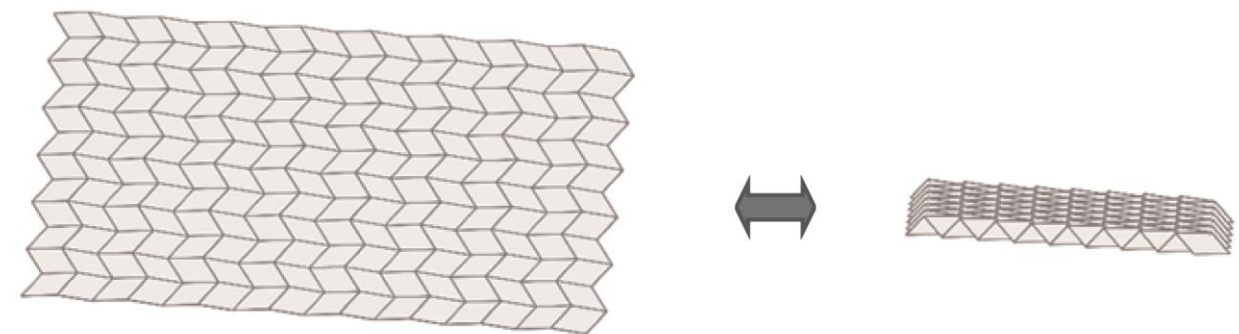
Back to the future ...



Origami – dobraduras / enovelamento



Origami design with rigid-foldability and flat-foldability is briefly described; Kinematic behavior and novel characteristics of origami structures are shown; Origami is gradually applied in aerospace, biomedicine, mechanisms and robotics.



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



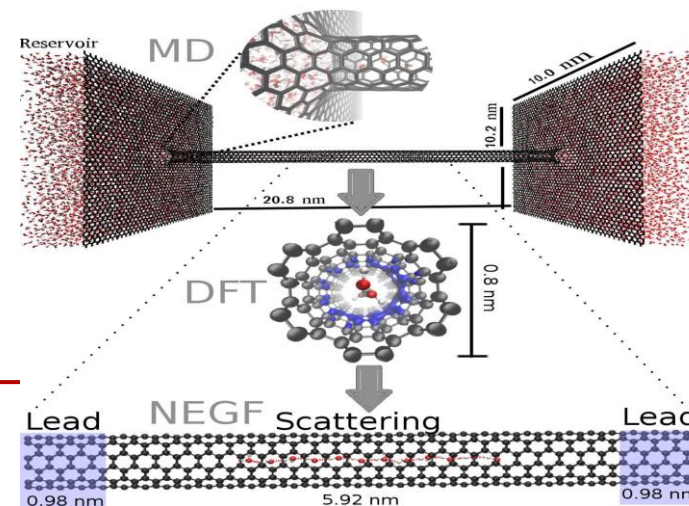
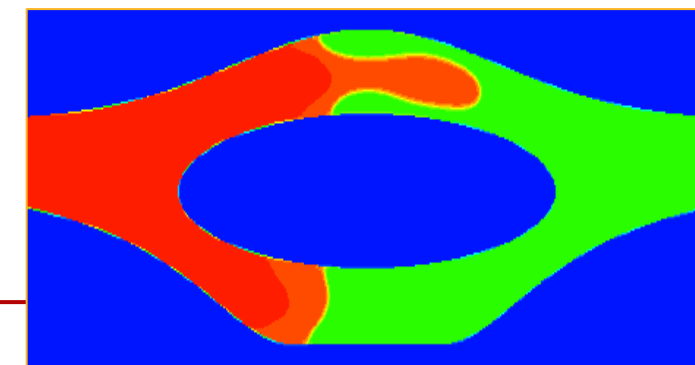
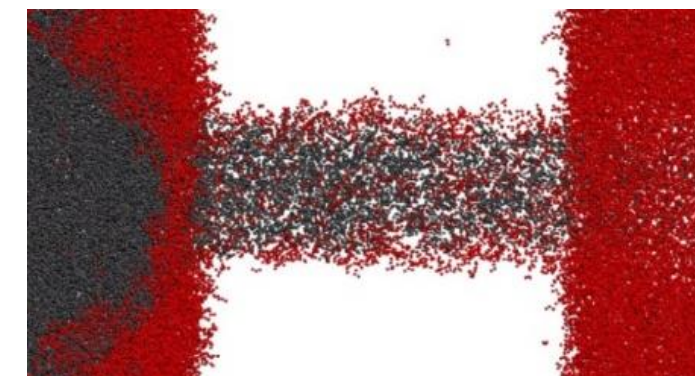
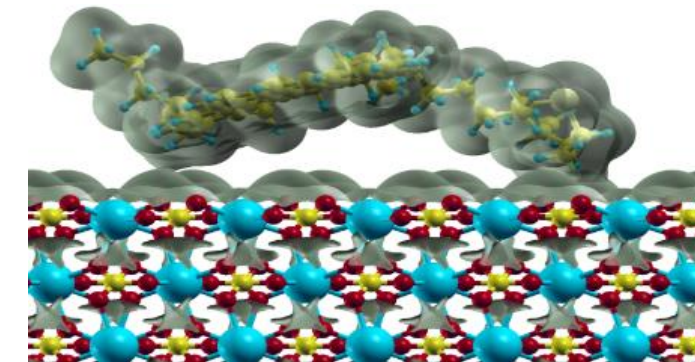
Projeto PUB 2584

Nanotecnologia, Física dos Materiais e Tecnologias Imersivas

Contato: Prof. Caetano R. Miranda - 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 it is not secure. The website 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 with the following details:

- ACONTECE NA USP / MATÉRIA DE CAPA / OPORTUNIDADES**
- Programa Santander USP de Inovação e Empreendedorismo / Criação de Startup Edição 2020**
- POR RNINA · 05/08/2020**
- Programa Santander USP de Inovação e Empreendedorismo / Criação de Startup Edição 2020**
- 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.
- Da Caracterização do Edital Santander Universidades: Bolsas de incentivo a Startup USP**
- 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 Windows taskbar at the bottom shows the search bar with the text "Type here to search" and the system tray with the date and time: 11:46 AM, 8/27/2020.

Link para o documento:

<https://docs.google.com/document/d/1hq1AUq-ZxiubIoWQAQP9McXhqDRZdOsP/edit>

https://www.virtualbox.org/

The screenshot shows a browser window with the URL [virtualbox.org](https://www.virtualbox.org/). The page features the VirtualBox logo on the left, a search bar, and a navigation menu with links for About, Screenshots, Downloads, Documentation, End-user docs, Technical docs, Contribute, and Community. The main content area includes a welcome message, a description of VirtualBox as a powerful x86 and AMD64/Intel64 virtualization product, and a large blue button that says "Download VirtualBox 6.1". Below this, there is a "Hot picks" section with links to Oracle Tech Network, Hyperbox, and phpVirtualBox. On the right side, there is a "News Flash" section with a list of recent releases, including VirtualBox 6.1.12, 6.0.24, 5.2.44, 6.1.10, and 6.1.8.

Caixa de ent x | M Inbox (11,82 x | Correio :: Ent x | IDEIAÇÃO DC x | 27 Universidade x | Brazil's budg x | Avisos x | Oracle VM V x

virtualbox.org

search...
Login Preferences

VirtualBox

Welcome to VirtualBox.org!

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
