

Simulação Computacional dos Materiais

Caetano Rodrigues Miranda

IFUSP

crmiranda@usp.br

AULA 5 – 03/09/2020

Parte A



sampa



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 large heading "VirtualBox Welcome to VirtualBox.org!" followed by a paragraph describing the product as a powerful x86 and AMD64/Intel64 virtualization product. Below this is a large blue button that says "Download VirtualBox 6.1". To the right, 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. At the bottom, a "Hot picks" section lists links to developer resources, Hyperbox, and the phpVirtualBox interface. The browser's taskbar at the bottom shows the Windows logo, a search bar, and several application icons, with the system tray displaying the time as 1:46 PM on 8/27/2020.

Caixa de ent x | Inbox (11,82 x | Correo :: Ent x | IDEACÃO DC x | 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

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

USUARIO: sampa

SENHA: stds9

Questionamentos

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

Planejamento dos projetos (Agosto a Dezembro 2020)

Google Design Sprint

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

Missão: proposta do projeto

PROPOSTA DO PROJETO

TEMA	NÚMERO DO PROJETO

TÍTULO

Não comece aqui. Deixe este campo para ser preenchido ao final da discussão do projeto.

Definição do Problema

Qual é o problema que motiva esta proposta? Identifique e defina um problema específico que seu projeto enfrentará.

Objetivo

O que queremos alcançar? Normalmente, um projeto tem um único objetivo com vários metas. Seja preciso e conciso na definição do objetivo que resolverá o problema acima. Se você identificar muitos "objetivos", considere dividi-los em diferentes projetos.

Metas

O que nós vamos fazer? Um conjunto de metas deve ser concluído com êxito para atingir o objetivo. Seja preciso e conciso ao definir as metas corretas para atingir o objetivo acima.

Métodos e atividades

Como vamos fazer isso? Escreva uma breve lista de atividades e métodos que você planeja usar, implementar ou desenvolver para cumprir as metas listadas acima. Você pode adicionar requisitos de recursos aqui, se achar apropriado.

Informações adicionais

Escreva quaisquer outras informações que possam esclarecer a sua proposta.

Apresentação Quinta (10/09)

Até 10 min por grupo

Planejamento dos projetos (Agosto a Dezembro 2020)

Google Design Sprint

AGOSTO

dia **1**



entender
definir

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

Menu do dia:

19:00 – Introdução da atividade (objetivo, dinâmica e resultado esperado)

19:15 – Separação nas diferentes salas – apresentação da equipe e discentes - ETAPA 0

19:30 – 20:00 – ETAPA 1 – Parte 2

20:00 – 20:30 – ETAPA 1 – Parte 3

20:30 – 20:40 – ETAPA 1 – Parte 4 (início) (4.2 e 4.3 para sexta)

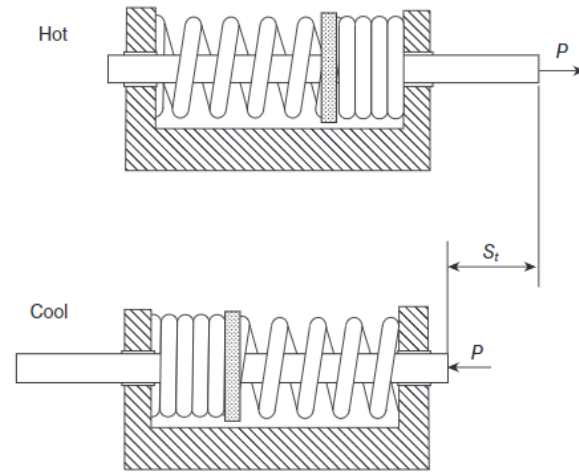
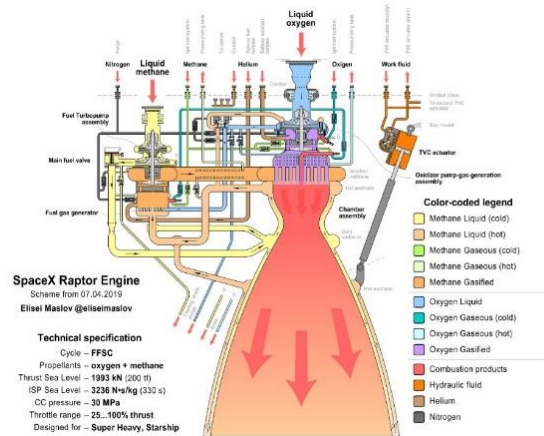
20:45 – Retorno a sala principal (meet.google.com/veg-znak-cxk)

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:

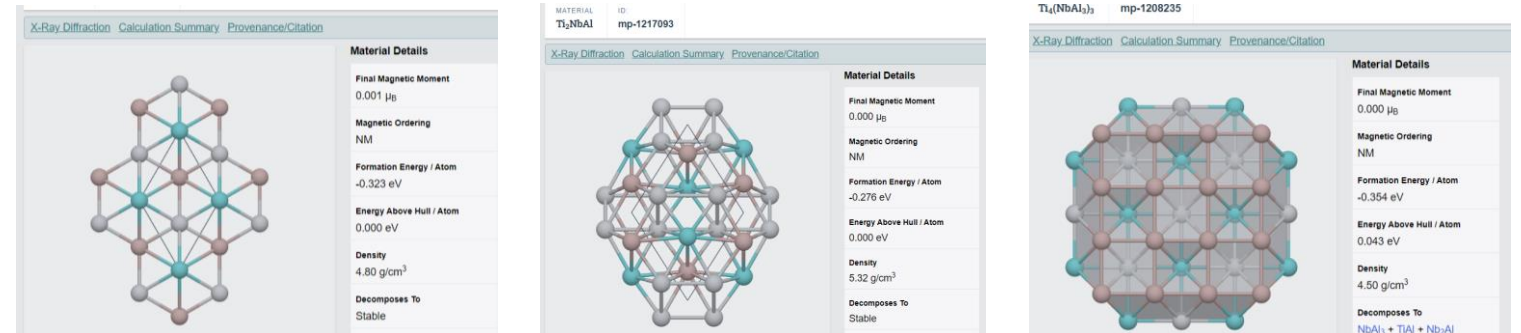
“Como esses três átomos interagem entre si???”

Obtenção de potenciais interatômicos Nb-Ti-Al.

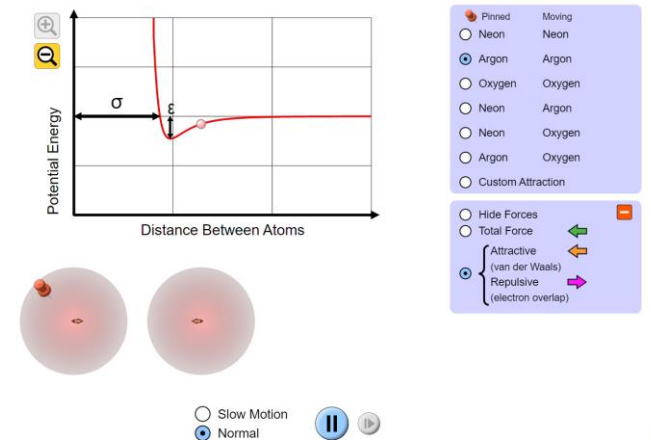
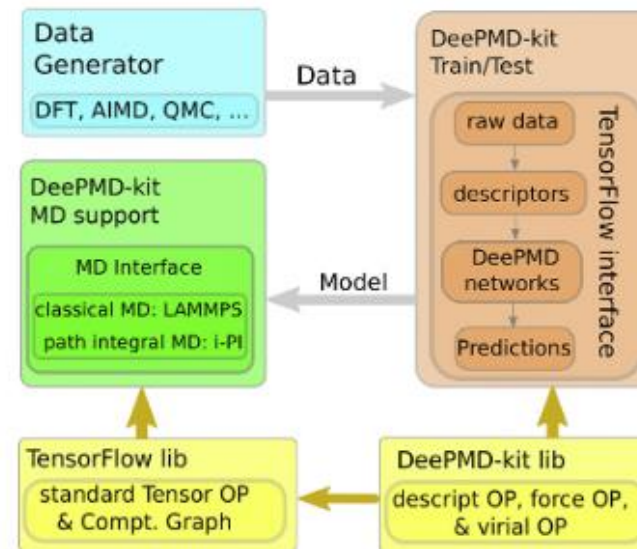
- ✓ Novas estruturas e composições para diversas aplicações.

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

Projeto 1 - Shape memory alloys (Nb-Ti-Al)

Bruno, Michele

Gabriel Farias Caccáos / 9017377

João Henrique Mazo / 4503057

Lauro Barreto Braz / 10740015

Wellington Silva / 8962036x

Link da reunião:

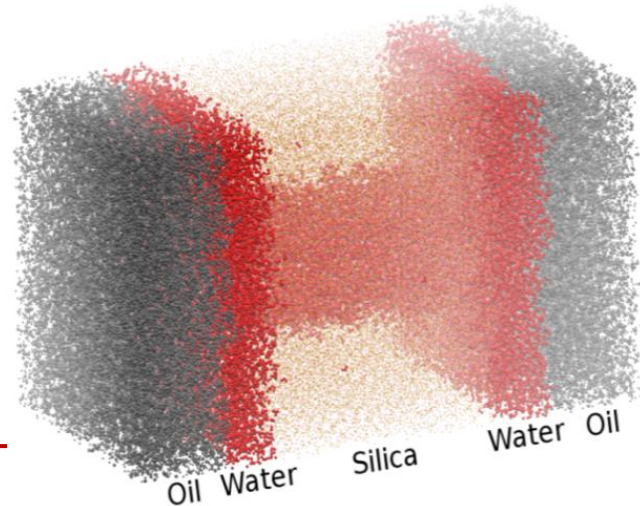
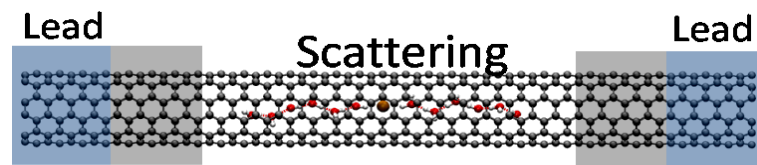
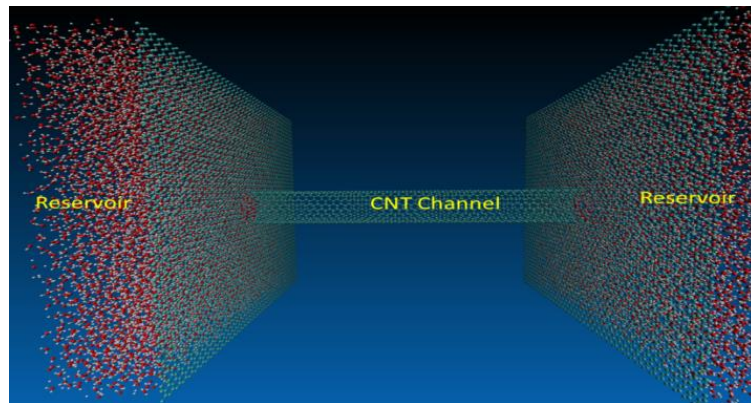
<https://meet.google.com/aop-csvn-myr>

Link do DOCS:

<https://docs.google.com/document/d/1gTAWShsON9Y9R6iJyd20NsYzBX2SW-gBGaAEH1M9S3I/edit?usp=sharing>

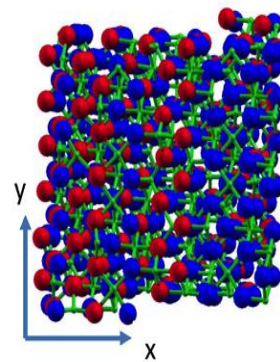
P2 - Materiais sob condições extremas

Nanofluidics (*fundamentals to devices*)

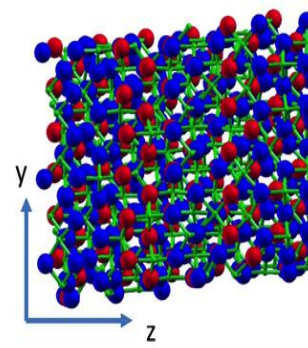


Atomistic pathways of pressure-induced densification of materials

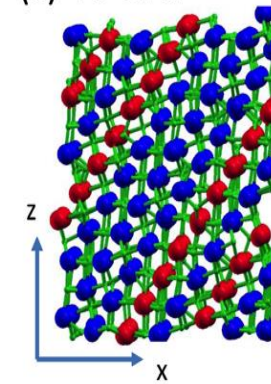
(a) 40 GPa



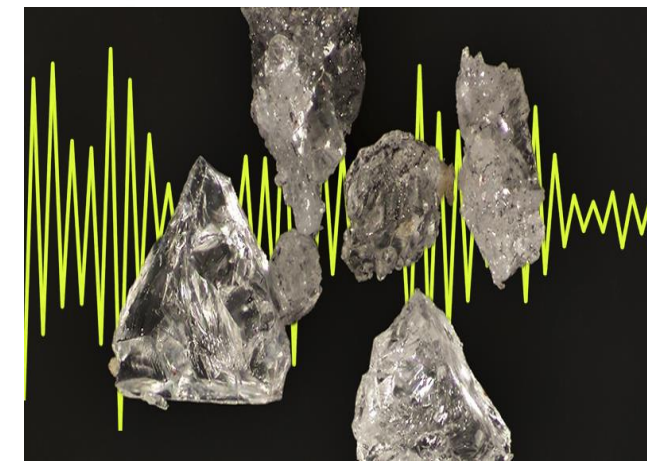
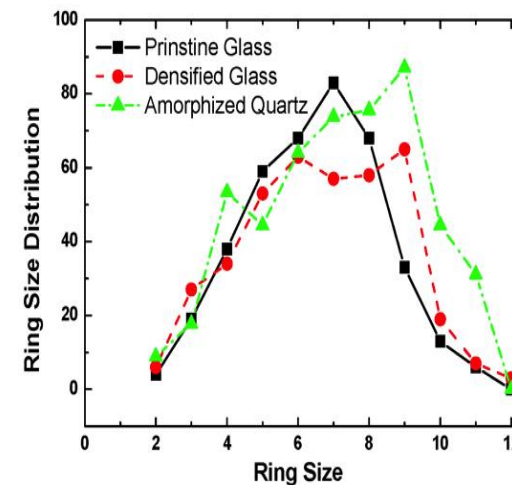
(b) 40 GPa



(c) 40 GPa



(e) 0GPa



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

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

Scientific Reports (2016)

Projeto 2 - Materiais sob condições extremas

Camilo, Caetano

Bruno Penteado 10300723

Brian Yurgel Moreira 9366422

Gabriel Rodrigues 9783341

Ricardo Rosa Junior 10300636

Link da reunião:

<https://meet.google.com/wyg-kath-akk>

Link do DOCS:

https://docs.google.com/document/d/1DDcofILeeiUBHzu2IHBtzW-ZzS7Ip95WJfhEuI_F4P0/edit?usp=sharing

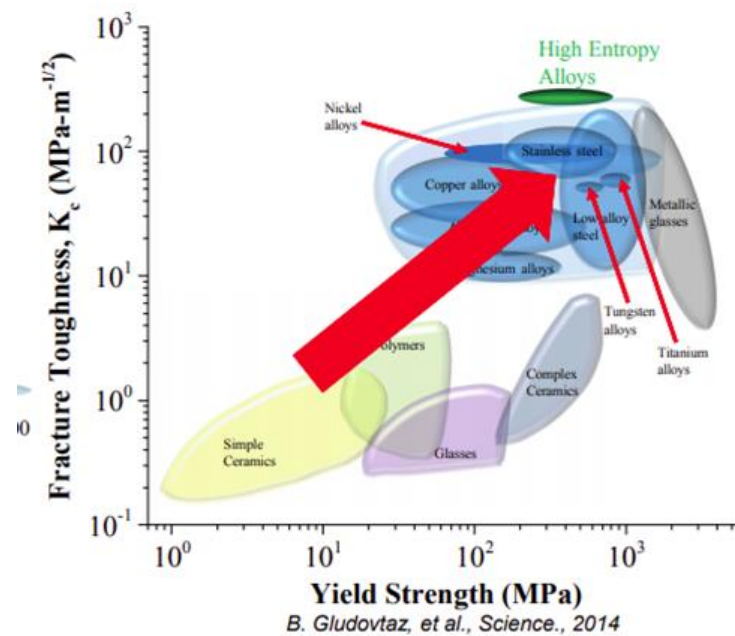
P4 - Descoberta de ligas resistentes a temperatura por aprendizado de máquina

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.

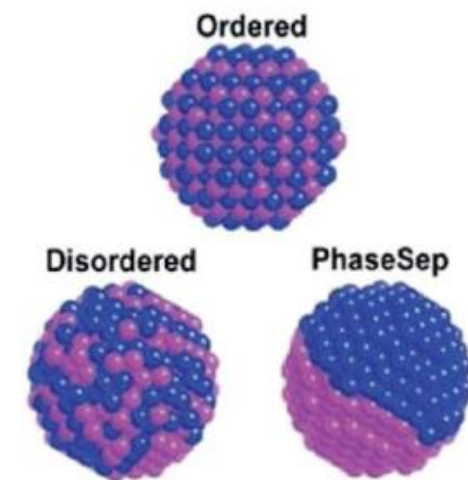
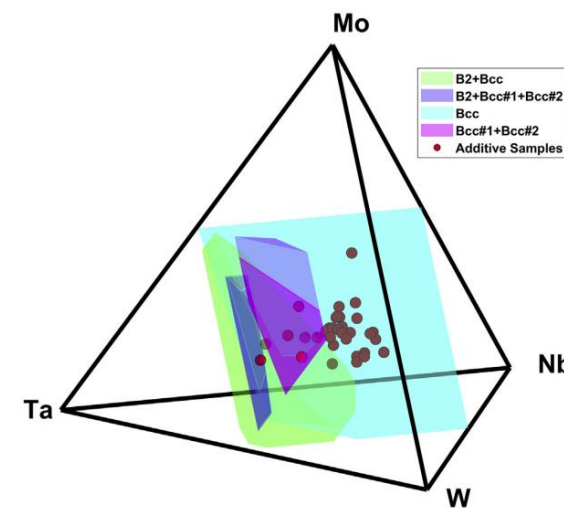


SpaceX Falcon Heavy®, 2018



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)

Projeto 3 - Descoberta de ligas resistentes a temperatura por Machine Learning

Gabriela, Camilo

Bianca 4683601

Jessica copel 10300403

Nicholas Funari 9359365

Thomas Felipe 10300560

Alexandre Teixeira 9301109

Link da reunião:

<https://meet.google.com/muh-vqkn-jno>

Link do DOCS:

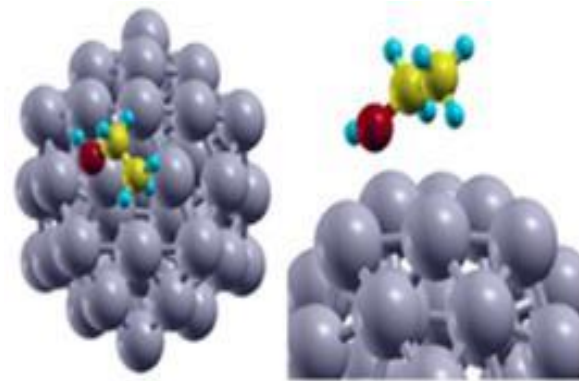
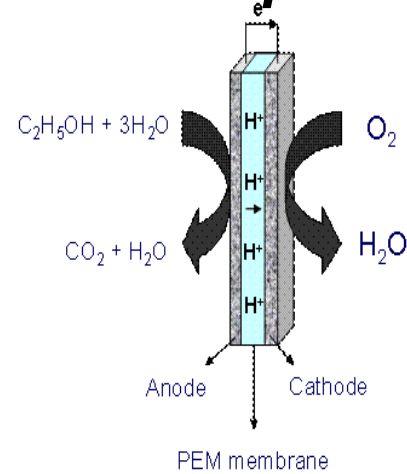
<https://docs.google.com/document/d/1dJeGHmnsXi8b1rDDbsPLwzG3Bycgll4joUXewK3PCxE/edit?usp=sharing>

P9 - Materiais nanoestruturados para aplicações de energia e infraestrutura

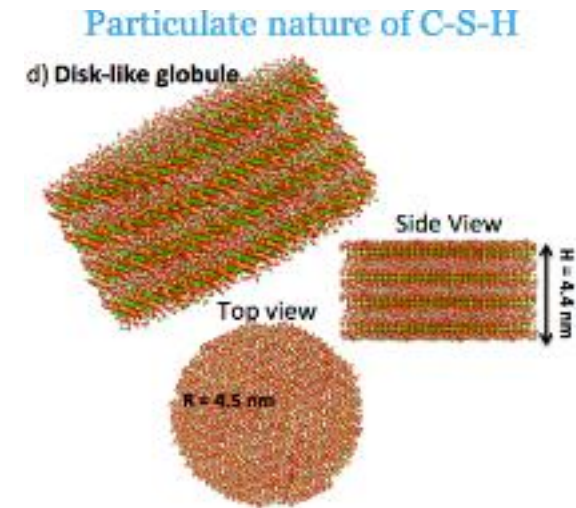
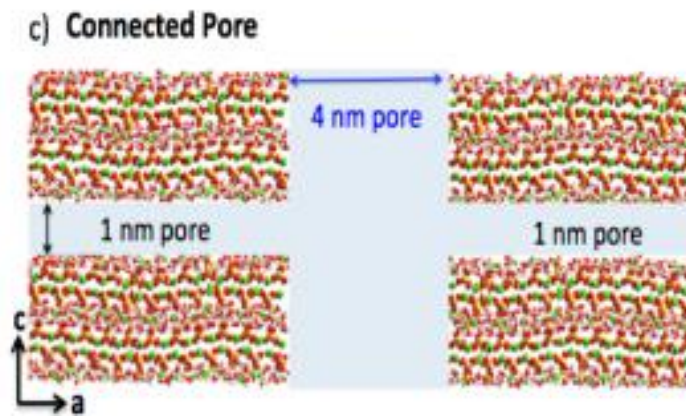
Materiais para armazenamento de energia e conversão

Água e CO₂ no cimento

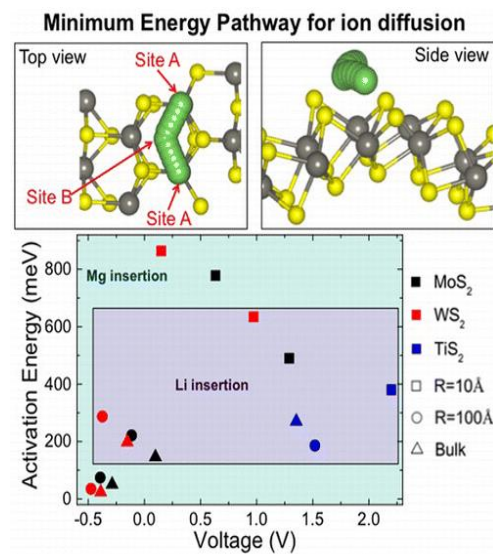
Molhabilidade em dispositivos eletroquímicos



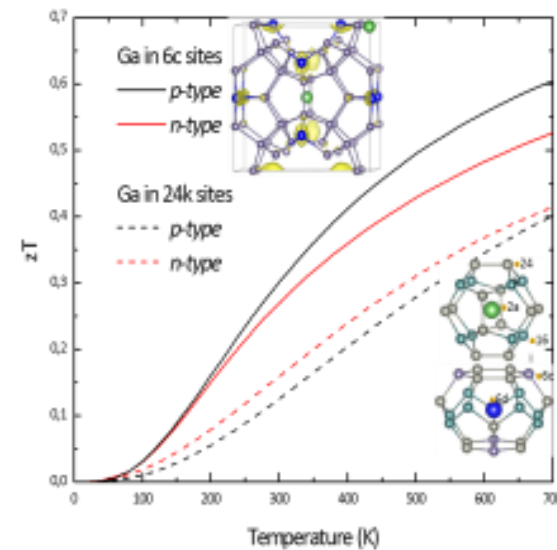
Ethanol catalysis @ NPs



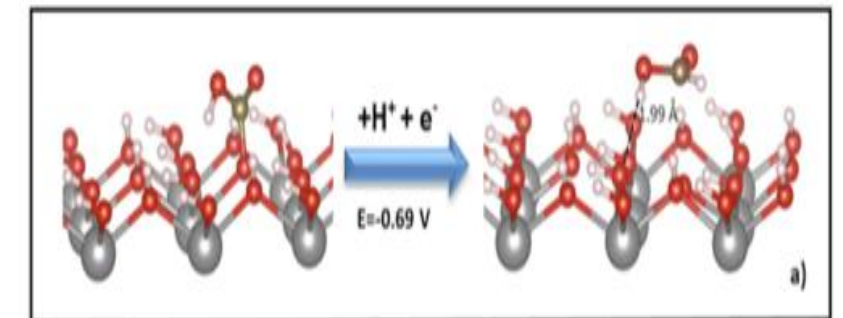
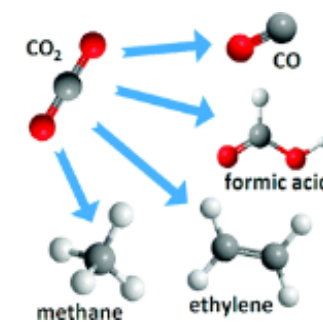
Direct alcohols fuel cells



Thermoelectrics



Conversão de CO₂ em matéria-prima



Batteries

Projeto 4 - Materiais nanoestruturados para aplicações de energia e infraestrutura

Henrique, Caetano

Maurício 10300810

Kelvin 8522595

Deivid Paschoa 9898307

Link da reunião:

<https://meet.google.com/dev-wgmn-ymj>

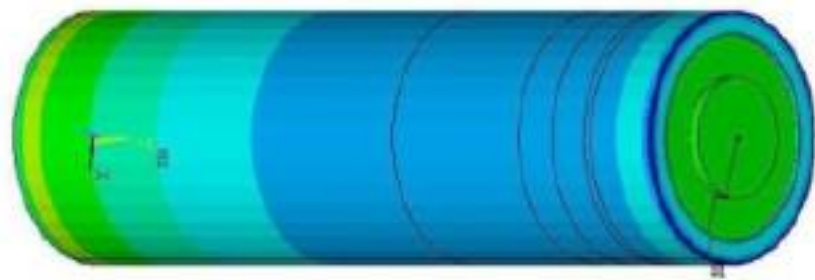
Link do DOCS:

<https://docs.google.com/document/d/1sKfSaofzRiZnsW-AECANBaPgSITDSj6lHUyWfDWIuts/edit?usp=sharing>

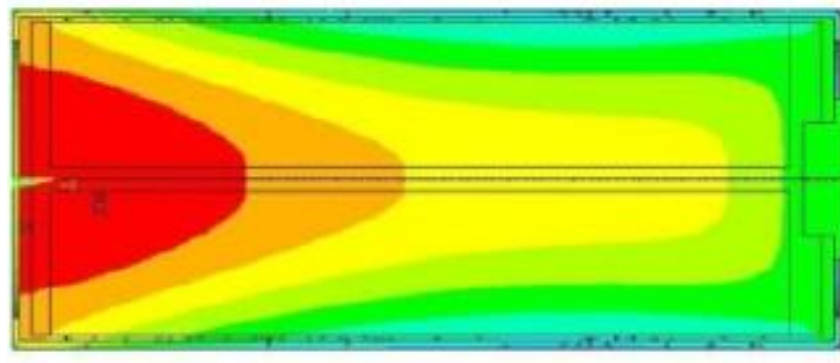
P10 - Distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li

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.

Projeto 5 - Distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li

Alvaro, Daniela

Andre Vergili 9796871

Vitor 7697290

Renato Cezar Peramezza Ribeiro

Link da reunião:

<https://meet.google.com/xtm-nmux-ecn>

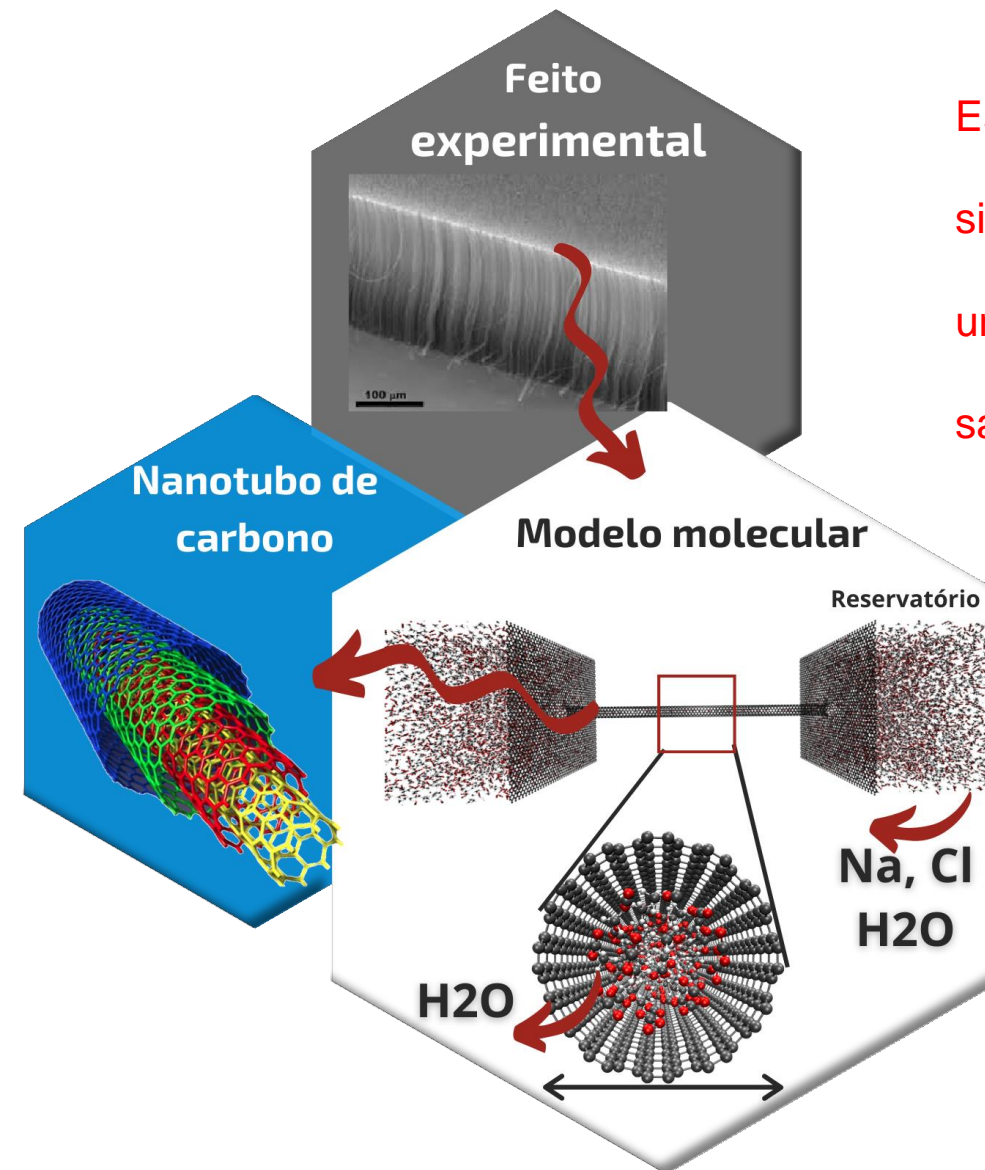
Link do DOCS:

<https://docs.google.com/document/d/1ANV4Flv02uWjo60a2fMkfFoKSdtKvUvHUD4HRM6ykbU/edit?usp=sharing>

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.

Projeto 6 - Estudo de membranas a base de carbono para desalinização da água

Alexsandro, Elizane

Rafaela Felix 10352541

Renan de Assis 9865401

Deivid Henrique 11277149

Teresa 9796662

Link da reunião:

<https://meet.google.com/uih-xqaf-sjq>

Link do DOCS:

https://docs.google.com/document/d/15CQnJ4qQHMDnndV2JJ-ZVSZRREotm4HB3Wlck7_LhsU/edit?usp=sharing

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



sampa

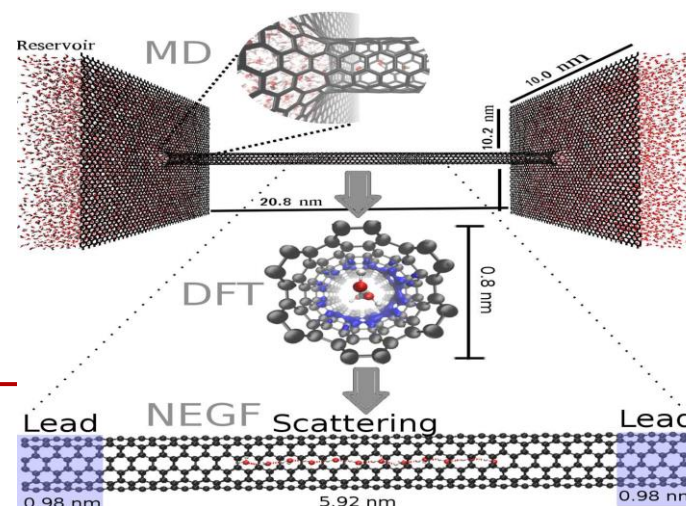
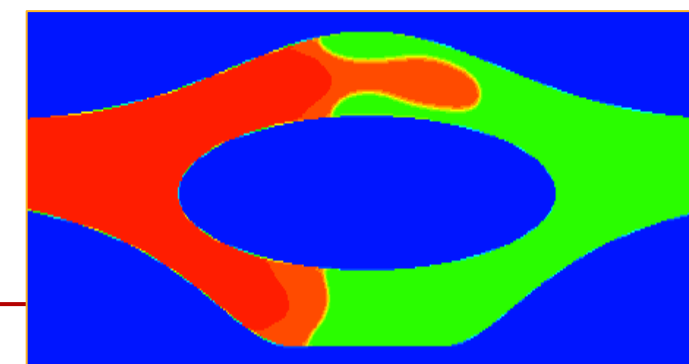
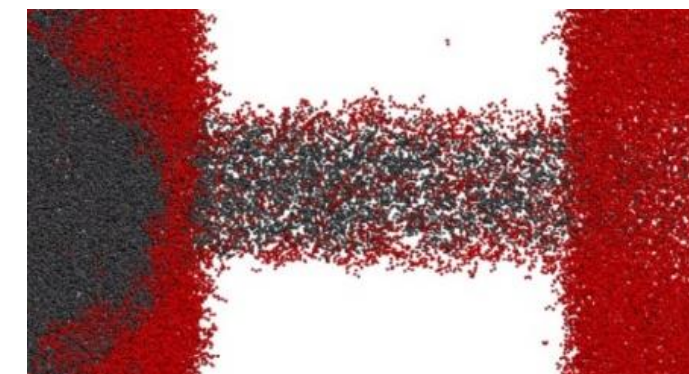
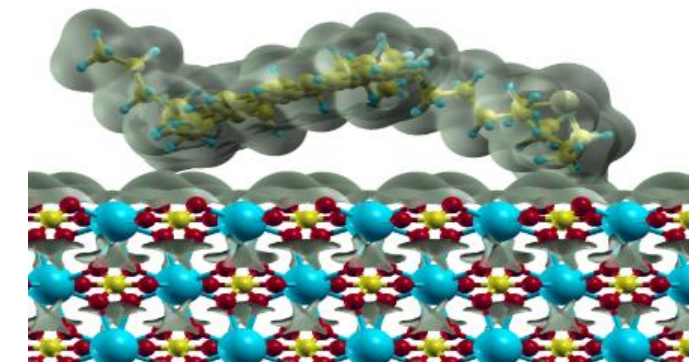
Projeto PUB 2584

Nanotecnologia, Física dos Materiais e Tecnologias Imersivas

Contato: Prof. Caetano R. Miranda - crmiranda@usp.br

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'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 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.