

SCM 2020

Prof. Caetano R. Miranda

IFUSP, São Paulo - Brazil

cmiranda@if.usp.br

Dra. Daniela Damasceno

Dr. Alvaro Torrez

INTRODUÇÃO A ELEMENTOS FINITOS

19/11/2020

<https://github.com/Sampa-USP/scm2020/>

Introdução ao Método dos Elementos Finitos

Parte 1

- Descrição do MEF;
- Conceitos fundamentais;
- Procedimento para análise de MEF

Parte 2

- Conceito de tensão;
- Deformação;
- equações constitutivas;
- AFEM;

Parte 3

- LabFEM 1 - Perna Protética
- LabFEM 2 - Bateria

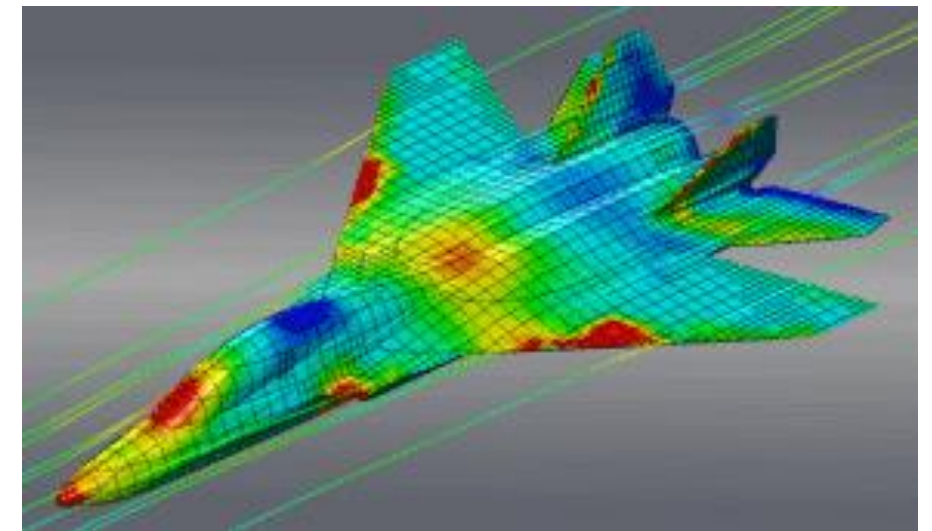
Parte 1

- O que é o método dos elementos finitos (MEF/FEM)?
- Breve histórico sobre o MEF
- Conceitos Fundamentais
 - Discretizar o domínio
 - Exemplo de solução discretizada
 - Objetivos
 - Métodos
- Vantagens e Desvantagens
- Análise de Elementos Finitos usando Software Comercial
 - CAD/CAE/CAM – Definições
 - Procedimento
 - Exemplo: Tabela de basquete

Bibliografia

O que é o Método dos Elementos Finitos (MEF/FEM)?

- É um método numérico para resolver problemas de campo (domínio de interesse) em engenharia e ciência;
- Este método tem sido amplamente utilizado para resolver problemas com geometrias e carregamentos complexos;
- Tem sido utilizado em problemas como:
 - Análise de tensão;
 - Mecânica dos fluidos;
 - Transferência de calor;
 - Difusão;
 - Vibrações;
 - Campos elétricos e magnéticos;



Breve histórico sobre o MEF

Entre 1941 – 1943: Foram apresentados soluções de tensões seguindo procedimentos considerados como MEF;

Em 1953: Início do uso do MEF na indústria aeronáutica;

Em 1960: O termo elemento finito foi atribuído por Clough;

1960 – 2020: Pesquisas e inúmeras publicações usando o MEF;

Em 1970: Surgimento dos primeiros softwares comerciais: ANSYS, NASTRAN, ABAQUS, etc;

Em 1980: disseminação do método e ampla utilização em diferentes áreas;

Meu primeiro exemplo em Elementos Finitos ...



Em 1974, o professor Shawn Buckley dirigiu um M.I.T. – IAP construir seus próprios quadros de bicicletas.

Marc Rosenbaum – Projeto de graduação

Meu primeiro exemplo em Elementos Finitos ...

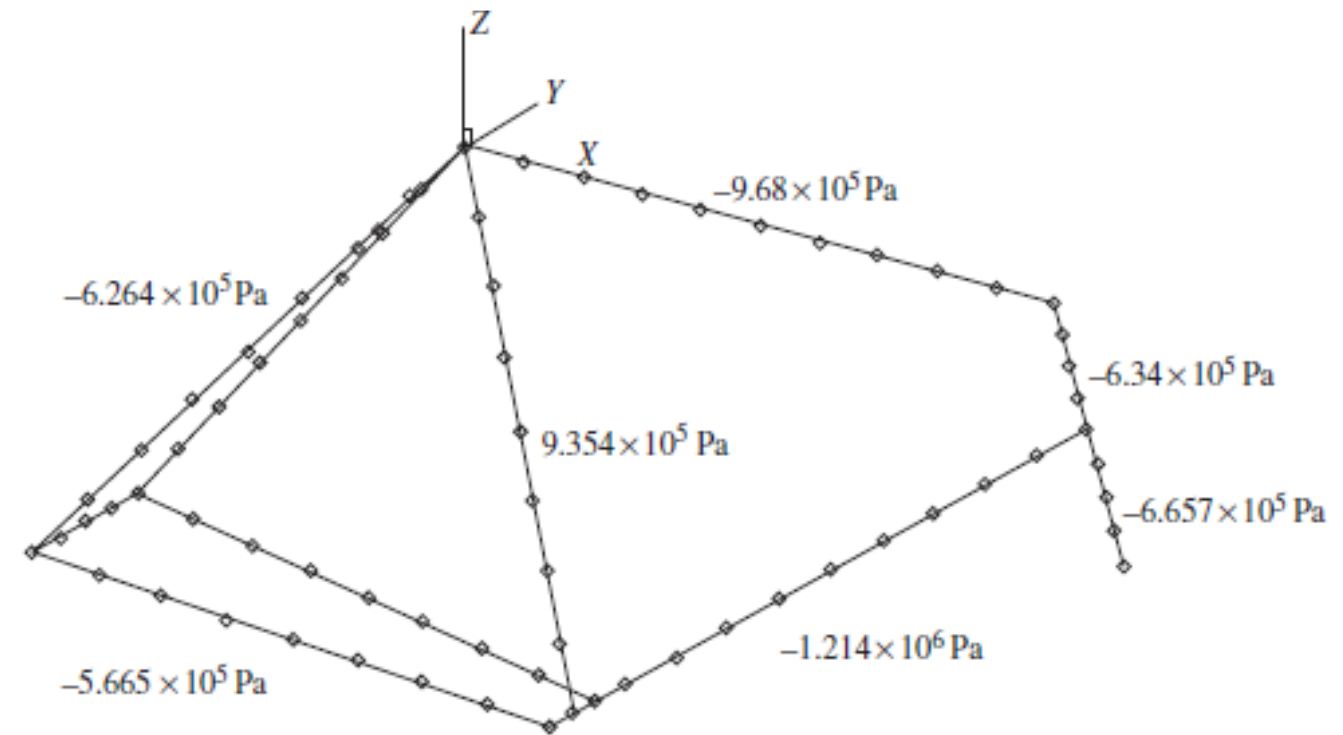


Figure 6.11. Stresses in the bicycle frame.

Projeto de graduação – MIT – 1974 – Marc Rosenbaum



Design de Marc

Usar componentes tubulares de diâmetro maior: a resistência aumenta conforme o cubo do diâmetro, então, a menos que haja restrições geométricas, melhor usar tubos de diâmetro maior com paredes mais finas para obter uma estrutura mais leve com resistência e rigidez aumentadas.

Use rolamentos de precisão vedados - de melhor qualidade e mais leves.

Ajuste de sacrifício - recursos de ajuste adicionam peso.

Ligas - Marc escolheu o alumínio 6061-T6 onde a soldagem era necessária e usou alumínio 2024-T4 e titânio (Ti 6Al 4V) em outros lugares.

Mg: é melhor por unidade de peso na flambagem por compressão, mas é frágil e difícil de extrudar.

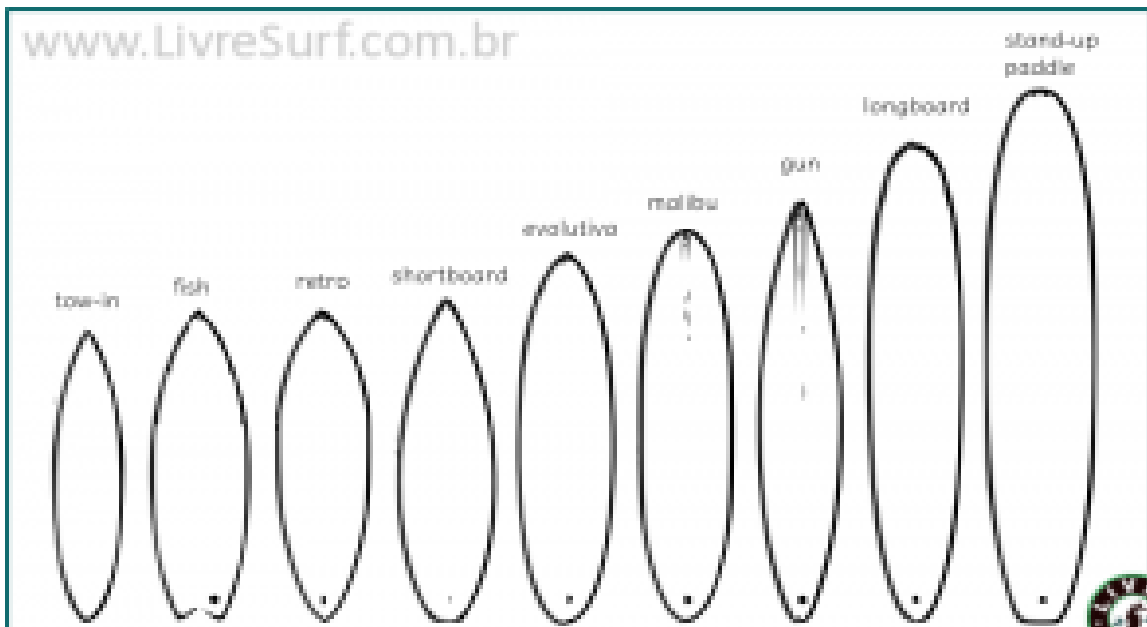
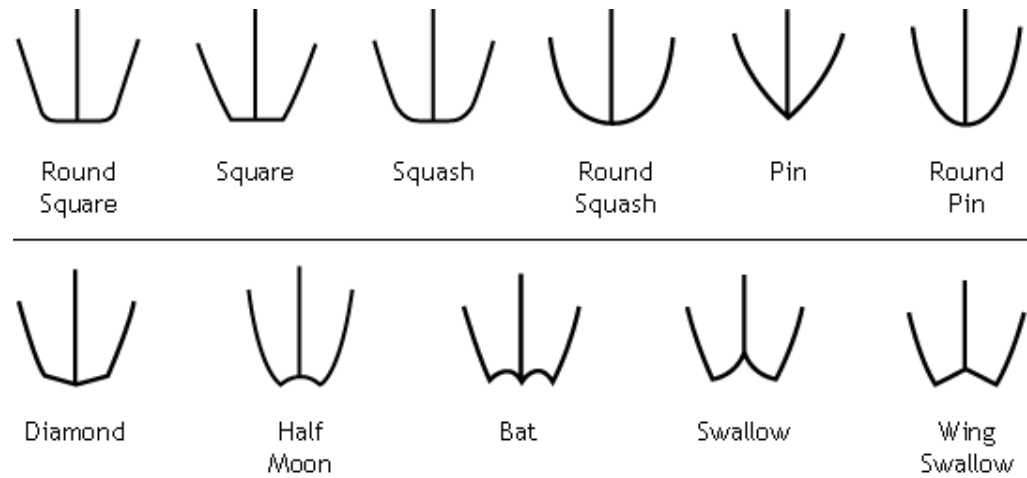
Al é mais fácil de soldar e fabricar do que o **Ti** e mais de duas vezes mais eficiente do que o aço contra a deformação por compressão.

As paredes nos tubos de aço existentes já estavam abaixo de 0,020 "- 0,025" e estariam sujeitas a deformações se fossem feitas mais finas para compensar o diâmetro aumentado.



2012 – Projeto IC – UFABC – Lucas Ferreira @ CRM

Que tal um kit para o surfista montar e desmontar sua prancha de acordo com o bico, rabeta , etc ... ?

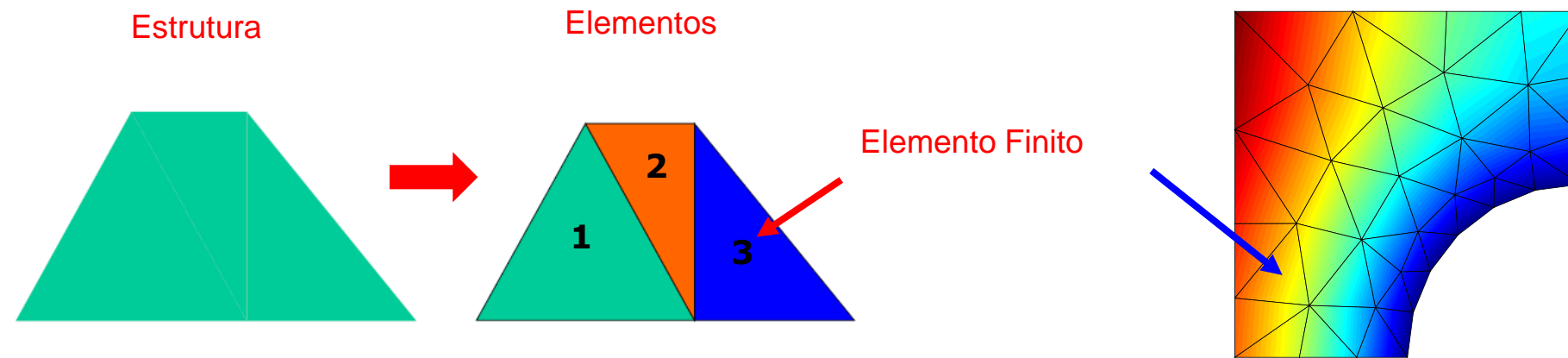


collapsible surfboard

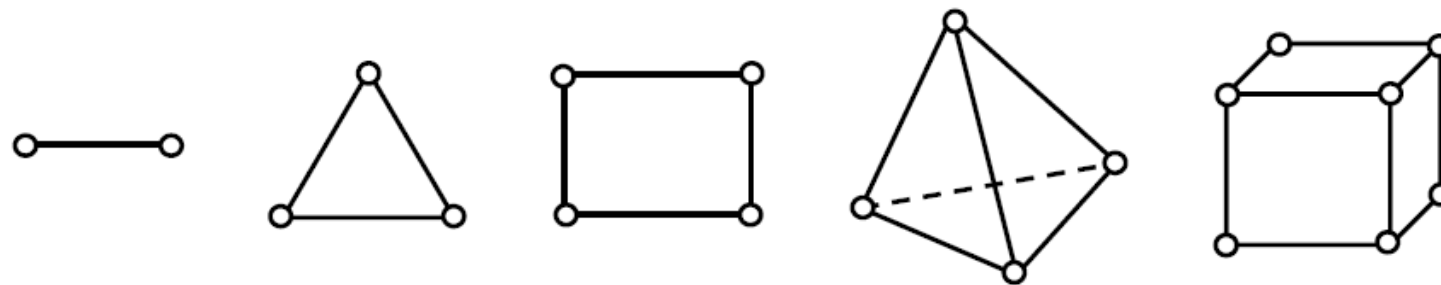
Conceitos Fundamentais

Discretizar o domínio

- Dividir o domínio/estrutura em um conjunto de formas simples (elementos);

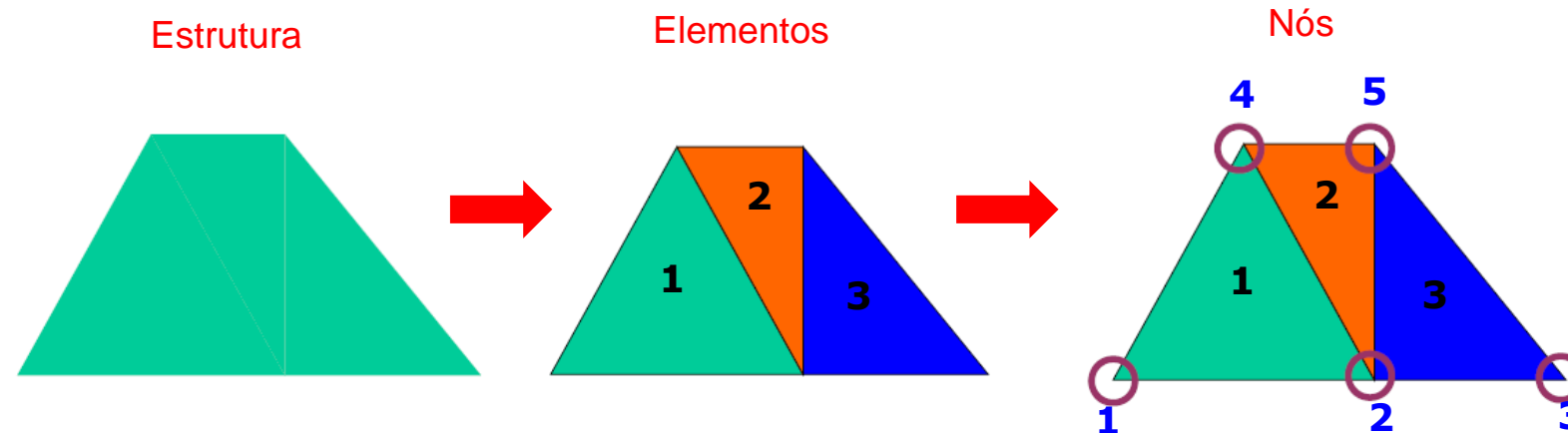


- Usar geometrias/formas simples (elementos)



Conceitos Fundamentais

- Todos os elementos são conectados por "nós"

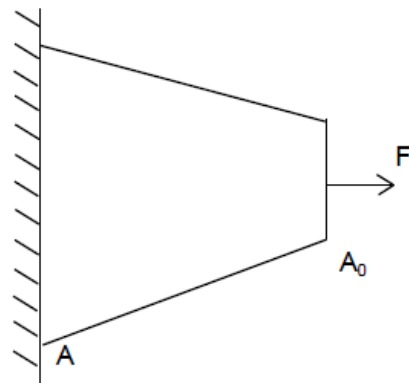


- A solução no elemento 1 é descrita usando os valores nos nós 1, 2 e 4 (Interpolação).
- Elementos 1 e 2 compartilham a solução nos nós 2 e 4 (mesmo GDL);
- Graus de liberdade:
 - Sistema Contínuo: Infinitos
 - MEF: Finito (origem do nome)

Conceitos Fundamentais

Exemplo de Solução Discretizada

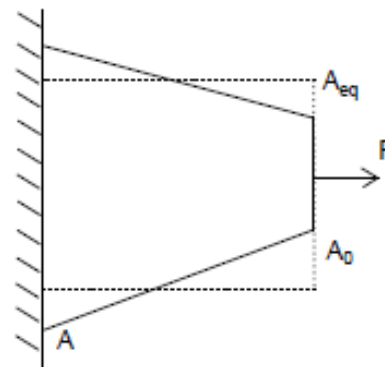
Modelo de barra em tração



solução analítica

$$u(x) = -\frac{FL_T}{2A_0E} \ln\left(1 - \frac{2x}{3L_T}\right)$$

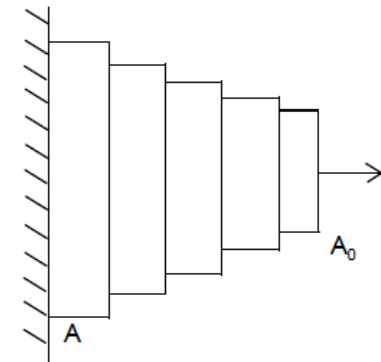
Modelo de barra em tração simplificado



solução aproximada

$$u(x) = \frac{Fx}{EA_{eq}}$$

Modelo de barra em tração discretizado



solução Discretizada

$$\begin{Bmatrix} F_i \\ F_j \end{Bmatrix} = \frac{E}{L} \begin{bmatrix} A_k & -A_k \\ -A_k & A_k \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix}$$

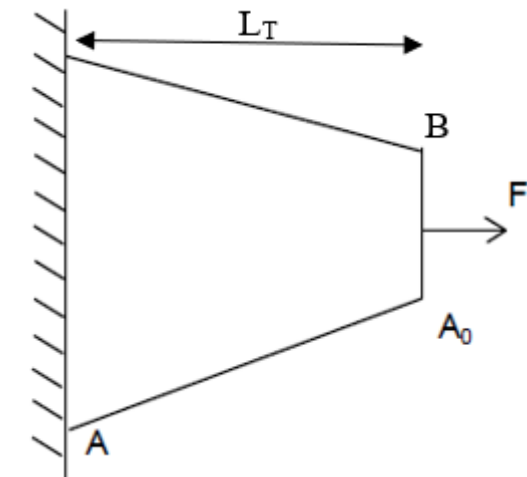
$$\begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ F \end{Bmatrix} = \frac{E}{L} \begin{bmatrix} A_1 & -A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -A_1 & A_1 + A_2 & -A_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A_2 & A_2 + A_3 & -A_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -A_3 & A_3 + A_4 & -A_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -A_4 & A_4 + A_5 & -A_5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -A_5 & A_5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{Bmatrix}$$

$$\{F_G\} = [K_G] \{u_G\}$$

Conceito de Discretização

Considere o problema de uma barra engastada com seção transversal variando e sendo tracionada por uma força F , conforme mostrado na figura 1. Determine o deslocamento da extremidade B da barra.

Figura 1: Esquema da barra em tração sendo analisada.



As propriedades a serem adotadas são:

1. Material obedece a lei de Hooke

$$\sigma_{xx} = E\varepsilon_{xx} \text{ e } \sigma_{xx} = F/A$$

Conceito de Discretização

2. Considere que uma barra em movimento axial é governada pela seguinte equação diferencial

$$EA \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = F$$

onde E é o Módulo de Elasticidade do material da barra, A é área da seção transversal da barra, u é o deslocamento axial, e F a força externa aplicada na extremidade B.

3. Determine $u(x)$, tal que a equação abaixo seja satisfeita.

$$E \frac{\partial}{\partial x} \left(A(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0$$

Sujeito a:

$$u(0) = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial u(L_T)}{\partial x} = \frac{F}{EA(x)}$$

Resolvendo as equações acima, no caso da seção constante tem-se:

Conceito de Discretização

Resolvendo as equações acima, no caso da seção constante tem-se:

$$u_B = \frac{FL_T}{EA}$$

E para o caso de a área variar linearmente, primeiro é necessário definir uma função que expresse a área $A(x)$ da seção transversal da barra ao longo do comprimento x

$$A(x) = \beta_1 + \beta_2 x$$

Sabendo que:

$$\begin{cases} A(0) = 3A_0 \\ A(L_T) = A_0 \end{cases}$$

Logo, temos a seguinte expressão, considerando as condições dadas:

$$A(x) = A_0 \left(3 - \frac{2x}{L_T} \right)$$

Conceito de Discretização

Substituindo esta equação anterior $A(x)$, na equação abaixo,

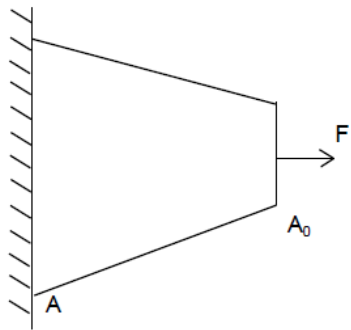
$$E \frac{\partial}{\partial x} \left(A(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0$$

E integrando para aplicar as condições de contorno, o deslocamento $u(x)$ é dado por,

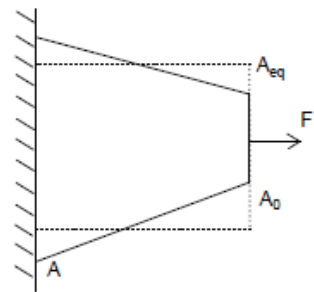
$$u(x) = - \frac{FL_T}{2A_0E} \ln \left(1 - \frac{2x}{3L_T} \right)$$

Conceitos Fundamentais

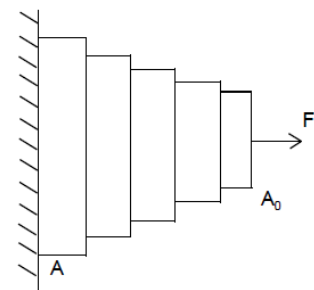
Exemplo de Solução Discretizada



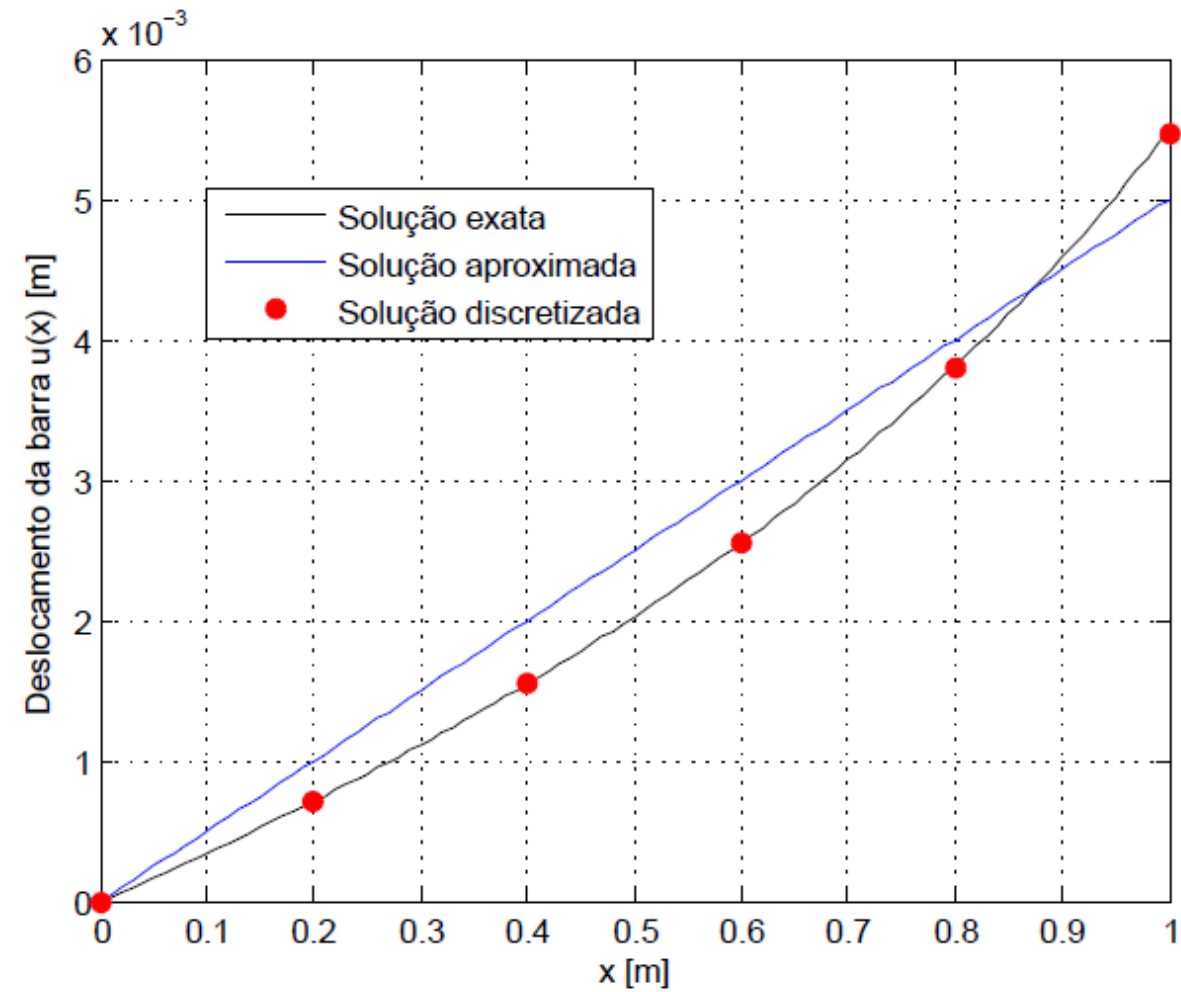
$$u(x) = -\frac{FL_T}{2A_0E} \ln\left(1 - \frac{2x}{3L_T}\right)$$



$$u(x) = \frac{Fx}{EA_{eq}}$$



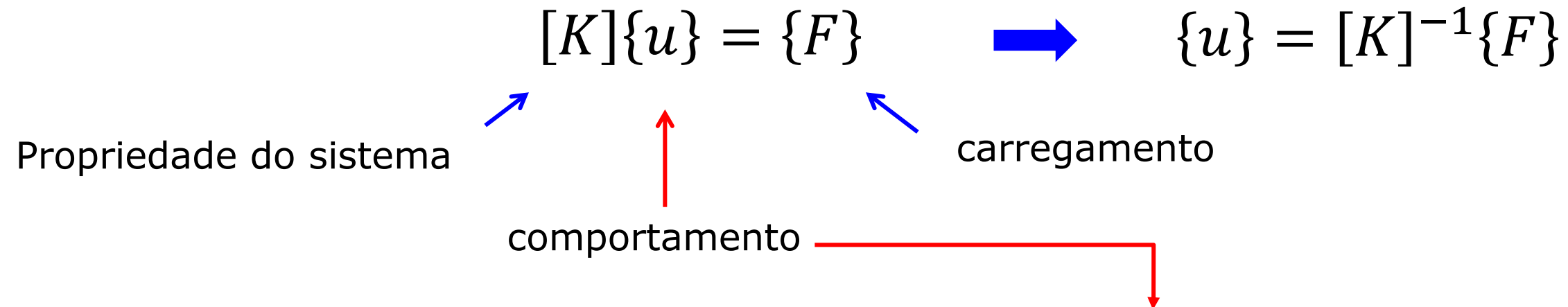
$$\{u\} = [K]^{-1}\{F\}$$



Objetivos

- Discretizar o domínio;
- Obter um conjunto de equações (para cada elemento);
- Fazer a montagem da:
 - matriz de rigidez global; $\longrightarrow [K]\{u\} = \{F\}$
 - vetor deslocamento global; \longrightarrow
 - vetor de força global; \longrightarrow
- Incluir as condições de contorno do problema;
- Resolver o sistema de equações para cada deslocamento nodal;
- Calcular tensão, deformação, etc...

Objetivos



	Propriedade [K]	$\{u\}$	Carregamento
Elastico	Rigidez	Deslocamento	Força
Térmico	Condutividade	Temperatura	Fonte de calor
Fluido	Viscosidade	Velocidade	Força no corpo
Eletrostático	Permissividade Dielétrica	Potencial elétrico	Carga

Determinar!

Métodos para Obter as Equações do MEF

- **Método Direto:**

 - restrito a problemas 1D; importante para compreensão do método;

- **Método de Energia**

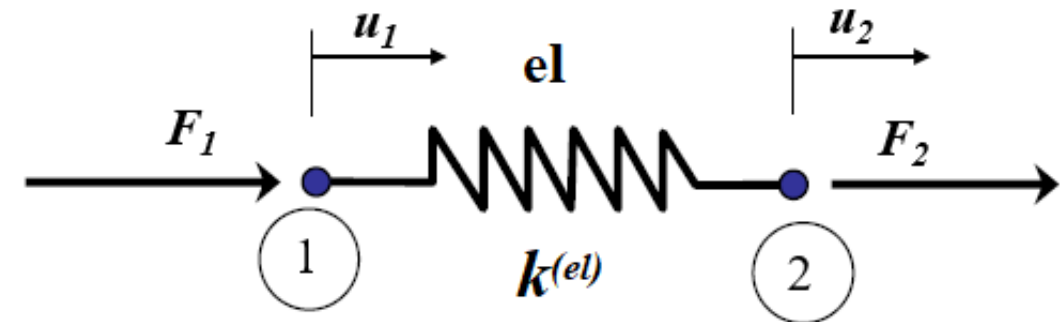
 - Princípio dos trabalhos virtuais e minimização da energia potencial do sistema;

- **Método dos Resíduos Ponderados**

 - Método de Galerkin

Exemplo Método Direto: Elemento de Mola

- Elemento el
- Nós 1 e 2;
- Constante da mola: $K^{(el)}$
- As forças aplicadas nos nós: F_1, F_2
- Deslocamentos: u_1 e u_2
- Força da mola: $F = ku$
- Equilíbrio Nó 1: $F_1 = k^{(el)}u_1 - k^{(el)}u_2$
- Equilíbrio Nó 2: $F_2 = -k^{(el)}u_1 + k^{(el)}u_2$



$$\begin{bmatrix} k^{(el)} & -k^{(el)} \\ -k^{(el)} & k^{(el)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{Bmatrix}$$

matriz de rigidez $\longrightarrow [K]\{u\} = \{F\}$

vetor dos deslocamentos \longrightarrow

vetor das forças nodais \longrightarrow

Vantagens e Desvantagens

- Modelamento de geometrias complexas;
- Grande variedade de problemas;
- Solução de problemas envolvendo efeitos não lineares, incluindo comportamento material, grandes deformações, condições de contorno;
- Carregamentos complexos: cargas nodais; carregamento distribuído; cargas dependentes do tempo;

- Obtenção de soluções aproximadas;
- Erros inerentes (aproximação do modelo matemático);
- Erros do usuário podem não ser detectados;

Análise de Elementos Finitos usando software comercial

CAD/CAE/CAM – Definições

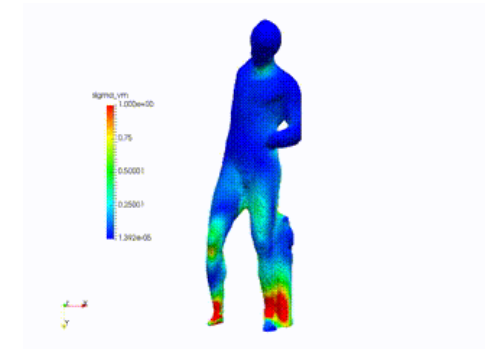
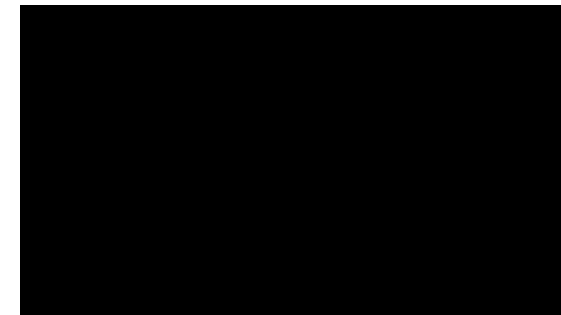
CAD – Computer Aided Design/ Desenho Assistido por Computador

- Desenhos de Engenharia (2D)
- Representação de sólidos (3D)
- Determinar Materiais, dimensões e tolerâncias

Análise de Elementos Finitos usando software comercial

CAE – Computer Aided Engineering/ Engenharia Assistida por Computador

- Tecnologia voltada para analisar o projeto (geometria CAD) através da simulação e estudo do comportamento do sistema.
- Análise de elementos Finitos
- Otimização
- Auxilia na tomada de decisões;



Análise de Elementos Finitos usando software comercial

CAM – Computer Aided Manufacturing/ Manufatura Assistida por Computador

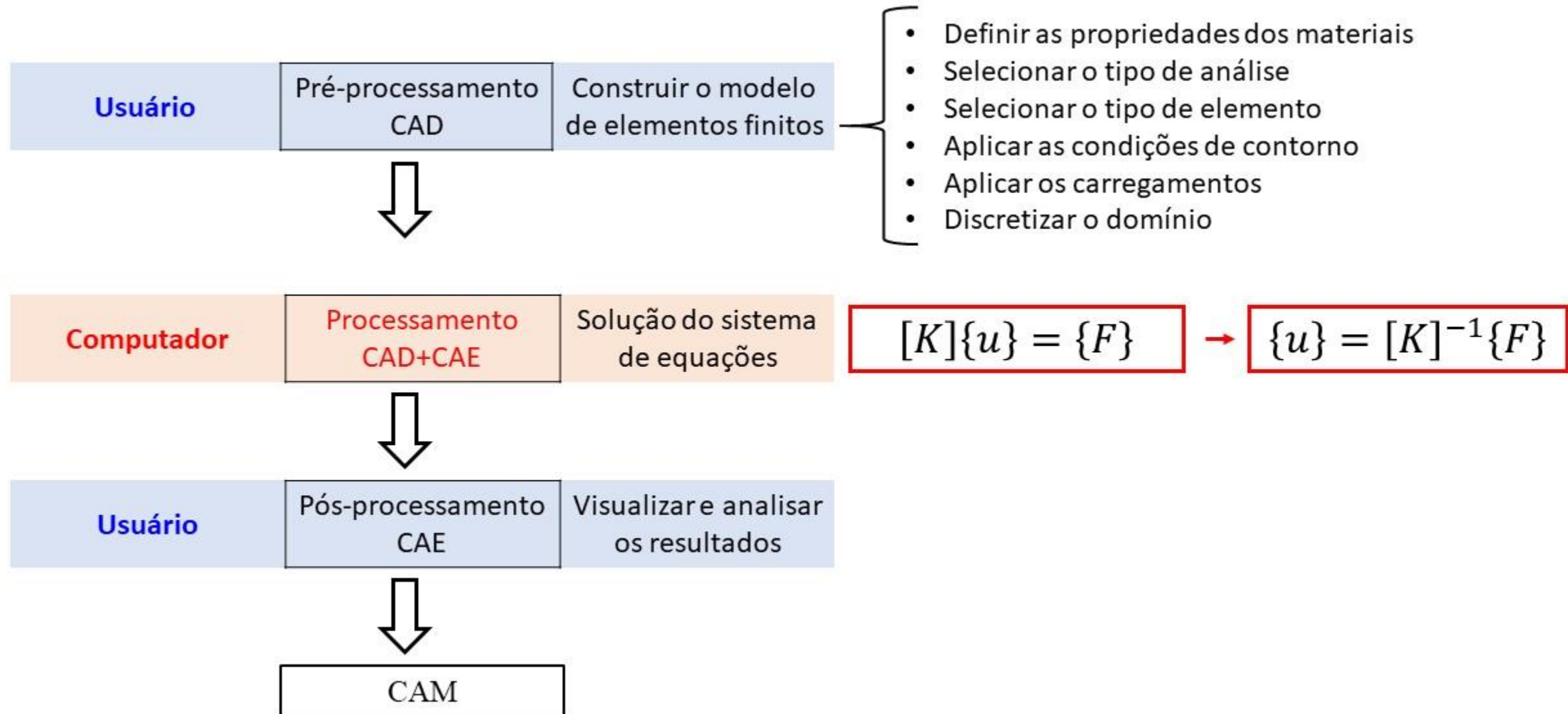
- Tecnologia voltada para controlar ferramentas de máquinas e equipamentos relacionados ao controle das operações e ao processo de fabricação.
- O processo está relacionado das máquinas que atendem aos comandos numéricos (CNC).

Basicamente o processo é:

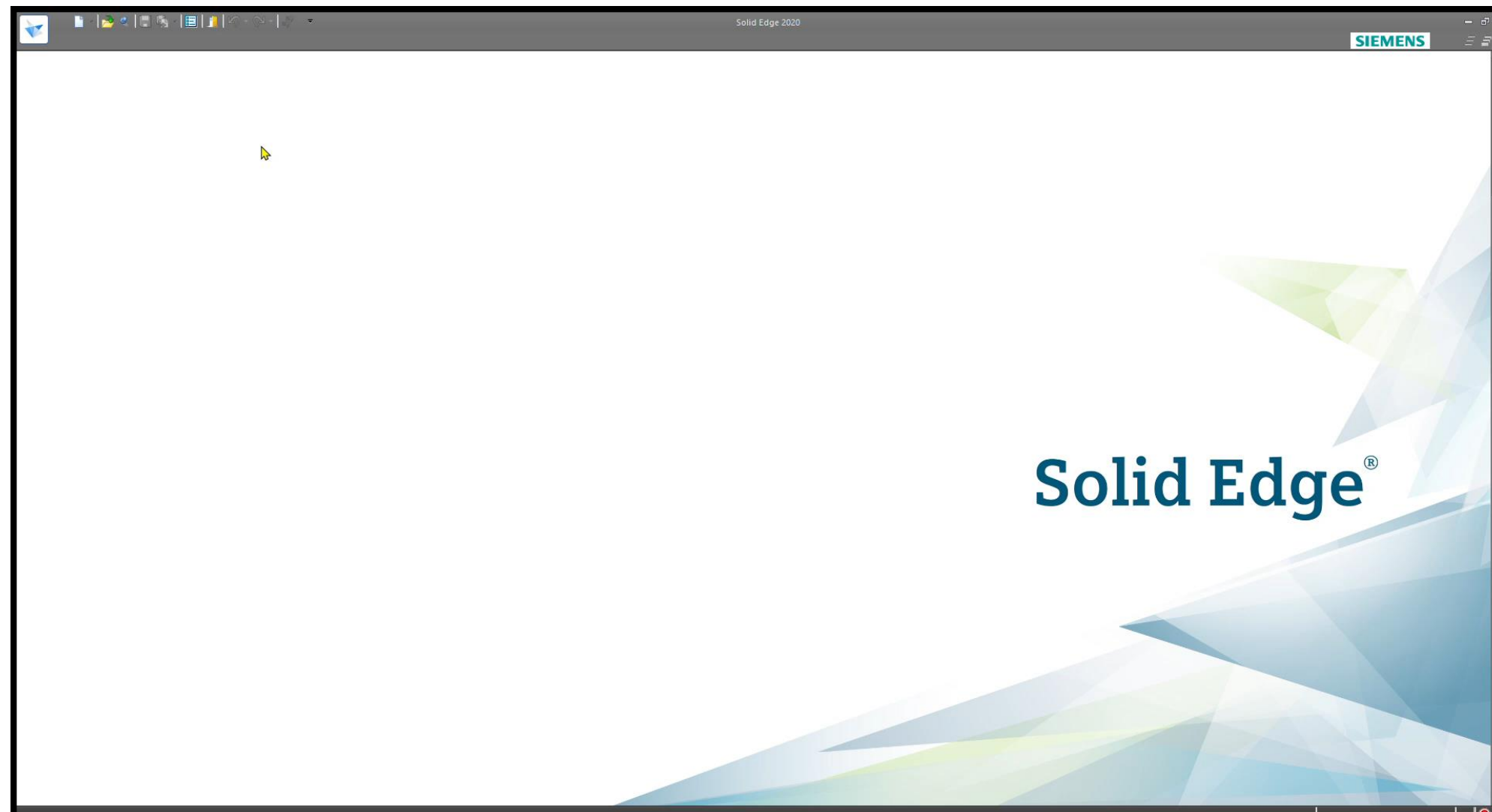
- Modelo;
- Remoção de material;
- Seleção da ferramenta;
- Usinagem;



Procedimento



Exemplo: Tabela de basquete



Bibliografia

Courant, R., "Variational Methods for the Solution of Problems of Equilibrium and Vibrations," *Bulletin of the American Mathematical Society*, Vol. 49, pp. 1–23, 1943.

Turner, M. J., Clough, R. W., Martin, H. C., and Topp, L. J., "Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures," *Journal of Aeronautical Sciences*, Vol. 23, No. 9, pp. 805–824, Sept. 1956.

Clough, R. W., "The Finite Element Method in Plane Stress Analysis," *Proceedings, American Society of Civil Engineers, 2nd Conference on Electronic Computation, Pittsburgh, PA*, pp. 345–378, Sept. 1960.

Zienkiewicz, O. C., and Cheung, Y. K., "Finite Elements in the Solution of Field Problems," *The Engineer*, pp. 507–510, Sept. 24, 1965.

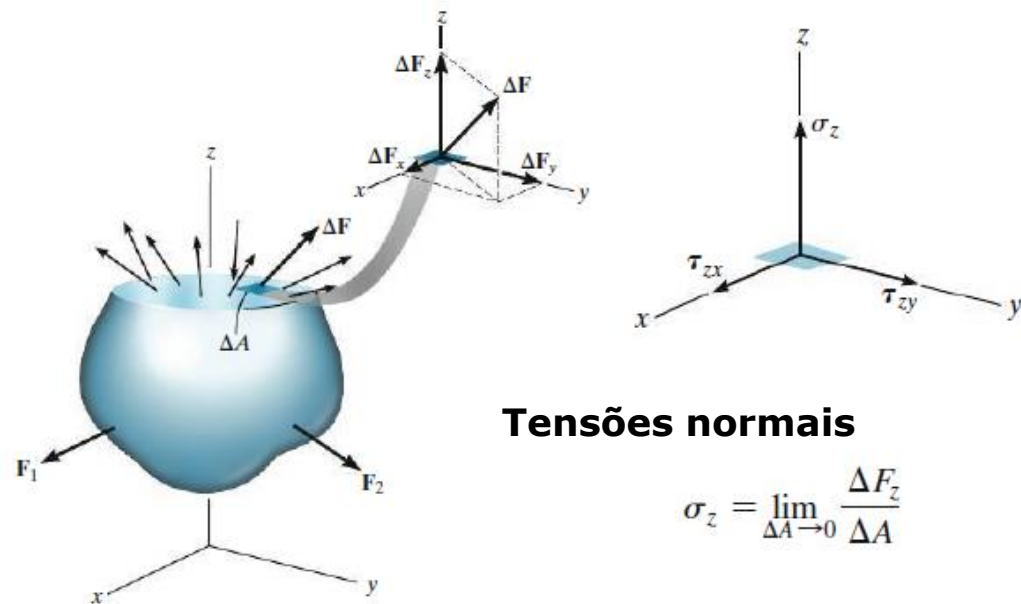
Parte 2

- Conceito de Tensão
- Deformação
- Coeficiente de Poisson
- Propriedade dos Materiais
 - Diagrama tensão x deformação
- Equações Constitutivas
- Relações entre Tensão e Deformação
- Grafeno: Diagrama Tensão – Deformação usando AFEM

Bibliografia

Conceito de Tensão

Corte paralelo ao plano x-y



Tensões normais

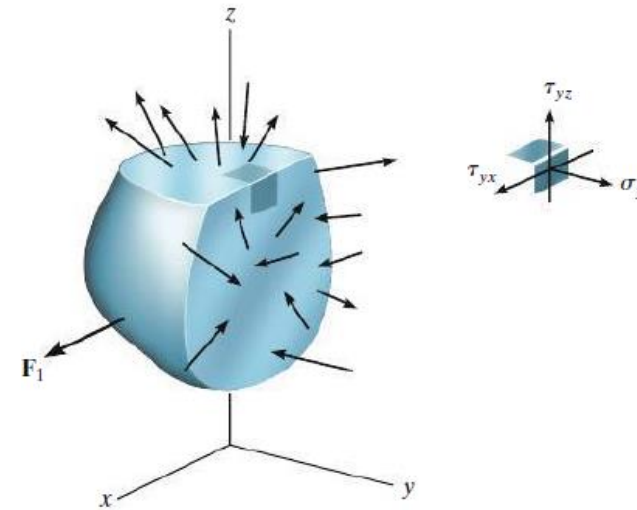
$$\sigma_z = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_z}{\Delta A}$$

Tensões de cisalhamento

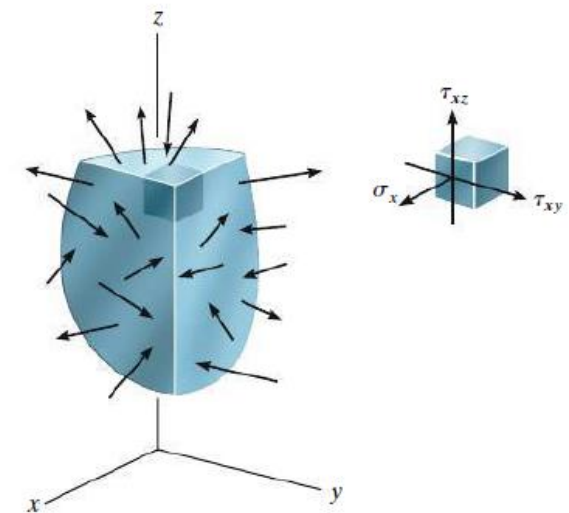
$$\tau_{zx} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_x}{\Delta A}$$

$$\tau_{zy} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_y}{\Delta A}$$

Corte paralelo ao plano x-z

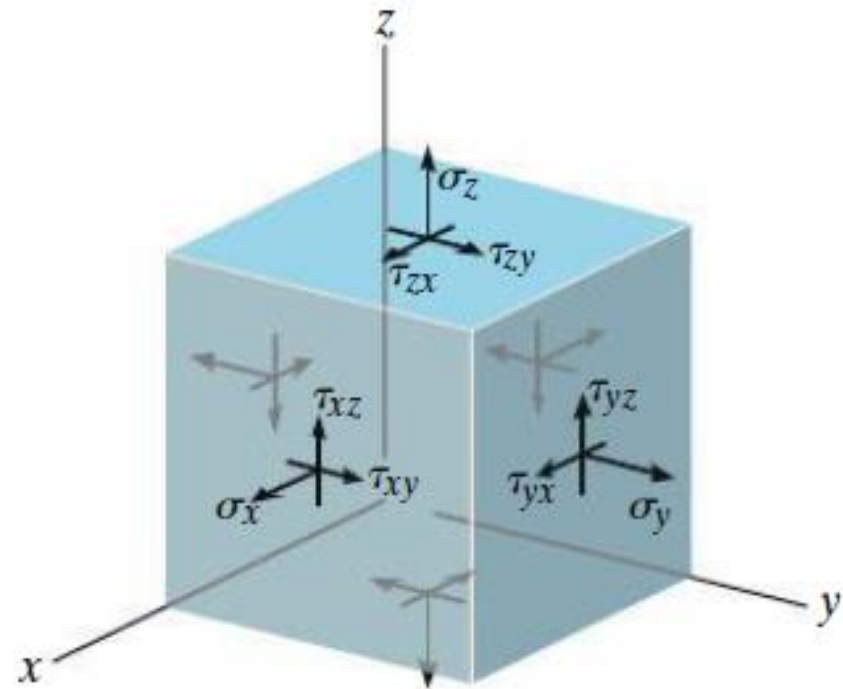


Corte paralelo ao plano z-y



Conceito de Tensão

Estado geral de tensão



Tensões normais

$$\sigma_x = \sigma_{xx} ; \quad \sigma_y = \sigma_{yy} ; \quad \sigma_z = \sigma_{zz}$$

Tensões de cisalhamento

$$\tau_{xz} = \sigma_{xz} ; \quad \tau_{xy} = \sigma_{xy}$$

$$\tau_{yz} = \sigma_{yz} ; \quad \tau_{yx} = \sigma_{yx}$$

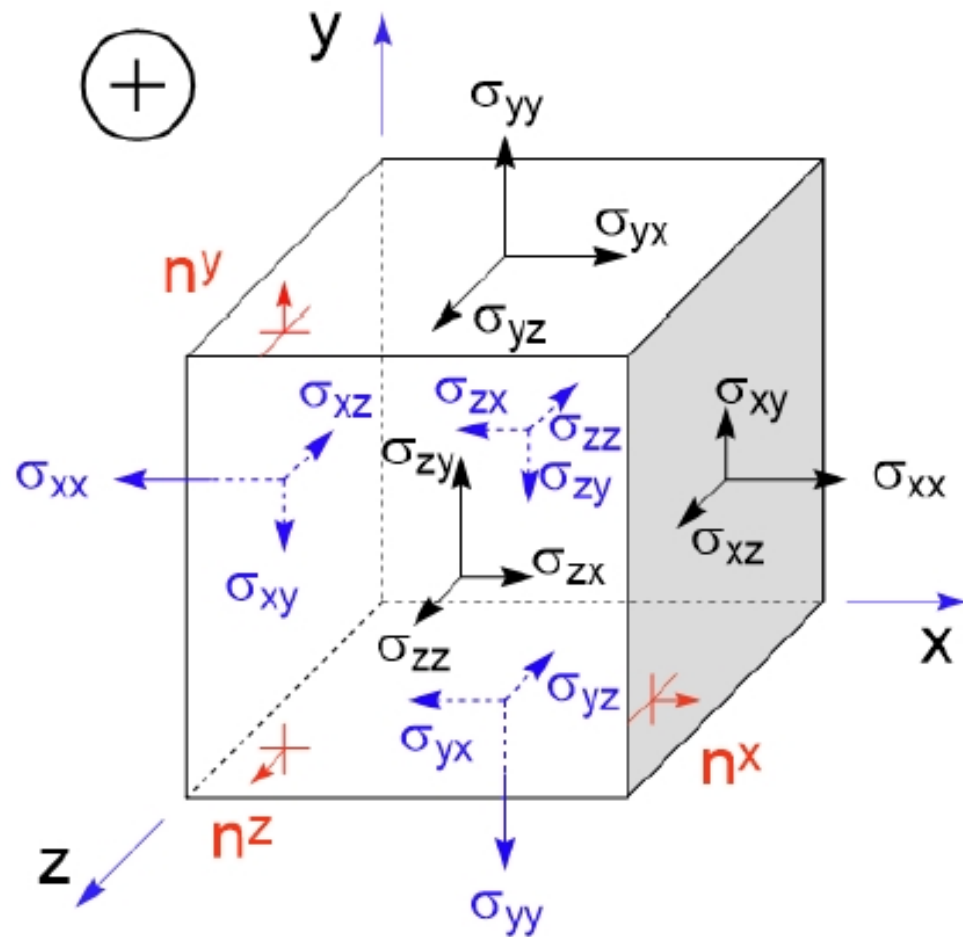
$$\tau_{zy} = \sigma_{zy} ; \quad \tau_{zx} = \sigma_{zx}$$

Em notação indicial: σ_{ij}

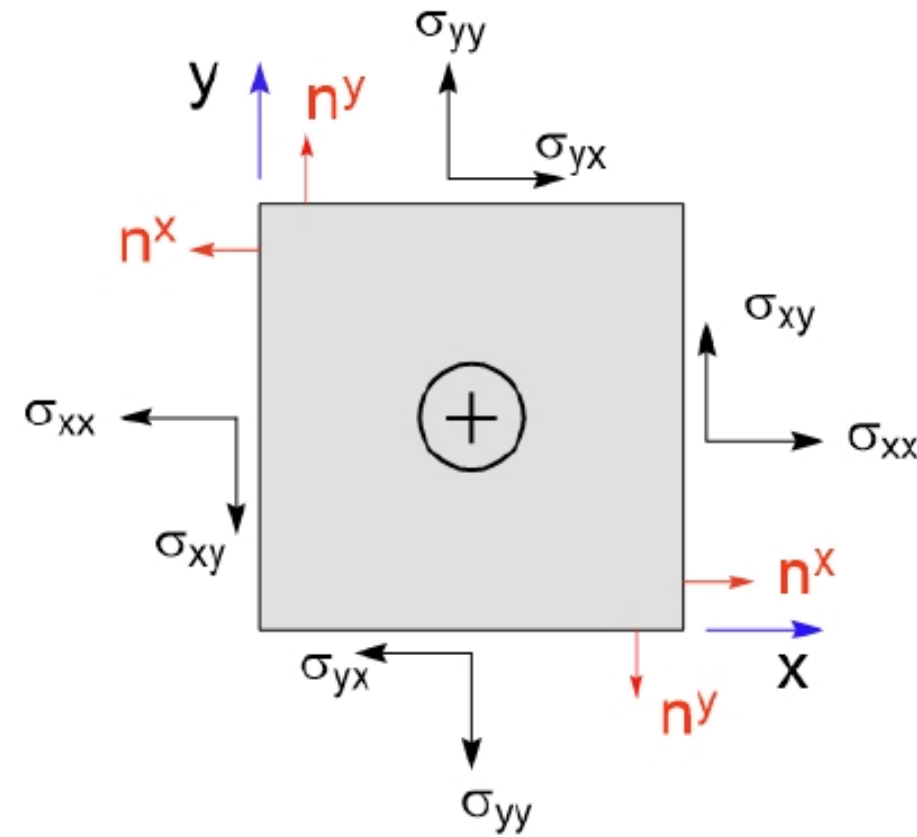
i : indica a normal da face onde o vetor atua;
j: indica a direção da componente em relação a um eixo cartesiano;

Conceito de Tensão

Estado de tensão 3D e convenção de sinais

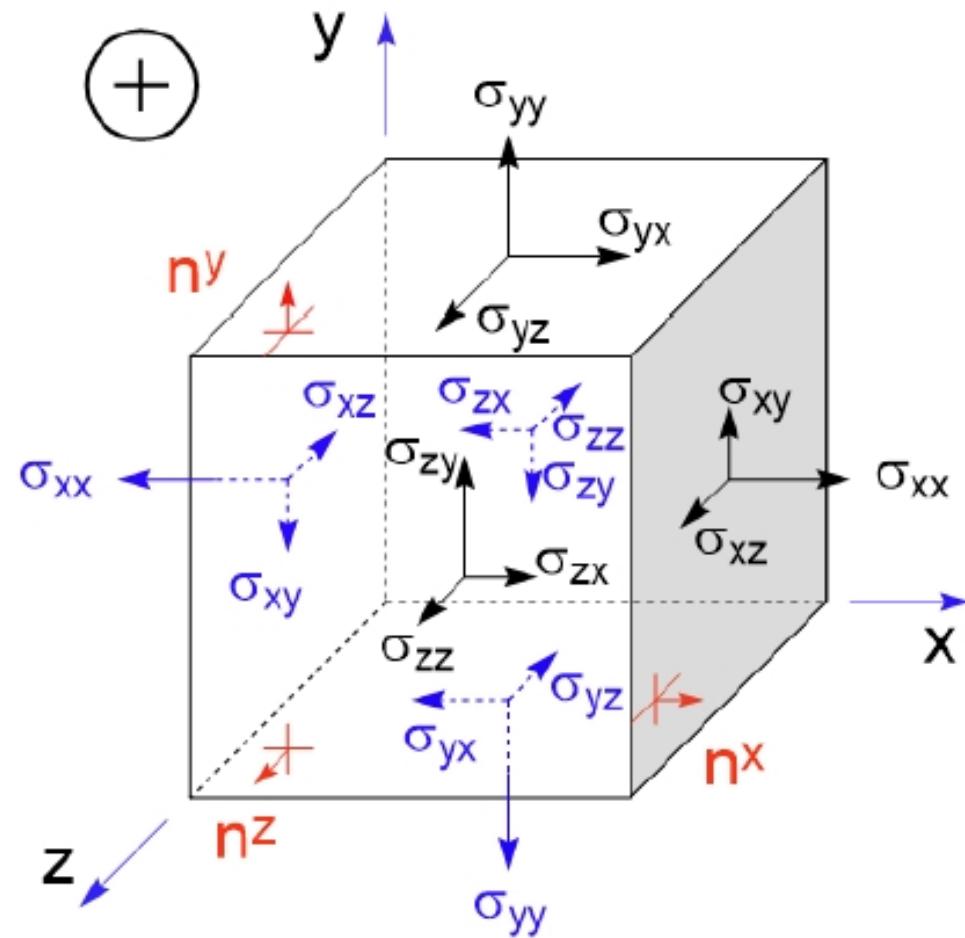


Estado Plano de tensões



Conceito de Tensão

Organizando as 9 componentes do estado de tensão, como um arranjo matricial:



$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

Simetria do Tensor de Tensões:

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$$

Deformação

Estado geral de deformação

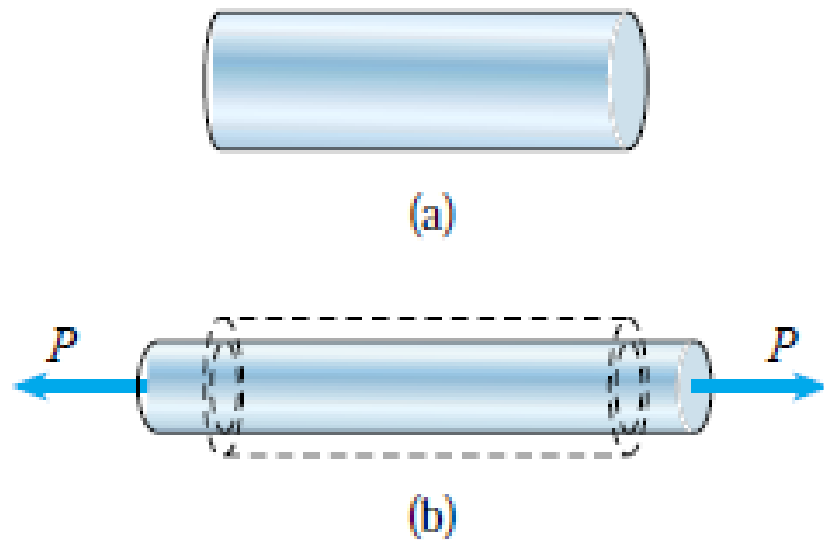
$$\varepsilon = \varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{XX} & \varepsilon_{XY} & \varepsilon_{XZ} \\ \varepsilon_{YX} & \varepsilon_{YY} & \varepsilon_{YZ} \\ \varepsilon_{ZX} & \varepsilon_{ZY} & \varepsilon_{ZZ} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \frac{du}{dx} + \frac{du}{dx} & \frac{du}{dy} + \frac{dv}{dx} & \frac{du}{dz} + \frac{dw}{dx} \\ \frac{dv}{dx} + \frac{du}{dy} & \frac{dv}{dy} + \frac{dv}{dy} & \frac{dv}{dz} + \frac{dw}{dy} \\ \frac{dw}{dx} + \frac{du}{dz} & \frac{dw}{dy} + \frac{dv}{dz} & \frac{dw}{dz} + \frac{dw}{dz} \end{bmatrix} \Rightarrow \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{du_i}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_i} \right)$$

Estado plano de deformação

$$\varepsilon = \varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{XX} & \varepsilon_{XY} \\ \varepsilon_{YX} & \varepsilon_{YY} \end{bmatrix}; \varepsilon_{XZ} = \varepsilon_{YZ} = \varepsilon_{ZX} = \varepsilon_{ZY} = \varepsilon_{ZZ} = 0.$$

Coeficiente de Poisson

- A relação entre a deformação específica lateral e a deformação específica axial é chamada de coeficiente de Poisson.



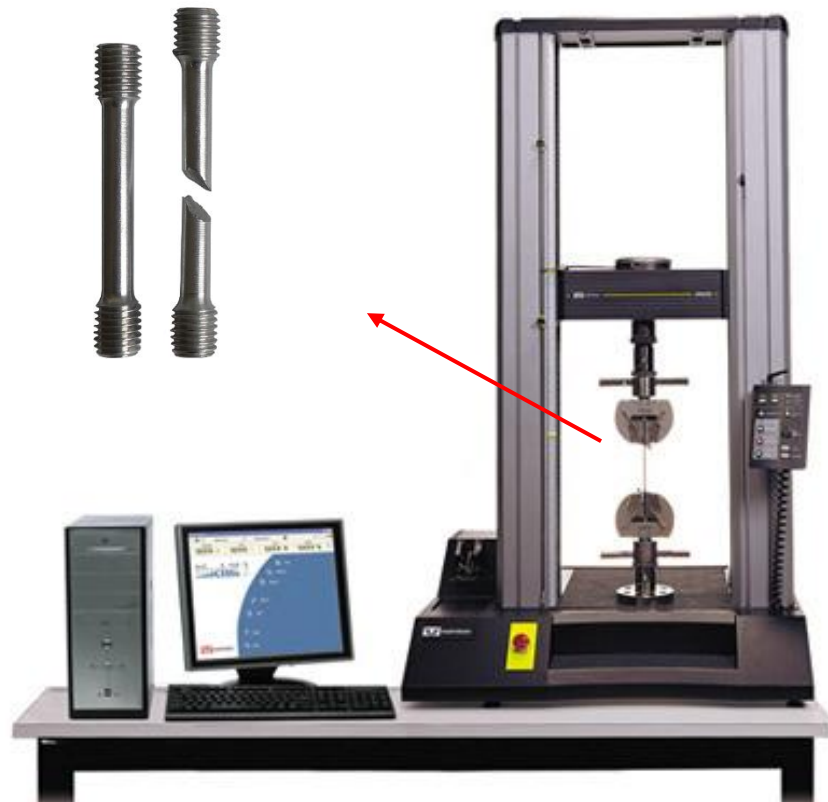
$$\nu = - \frac{\text{deformação específica lateral}}{\text{deformação específica axial}}$$

$$\nu = - \frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_x} = - \frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_x}$$

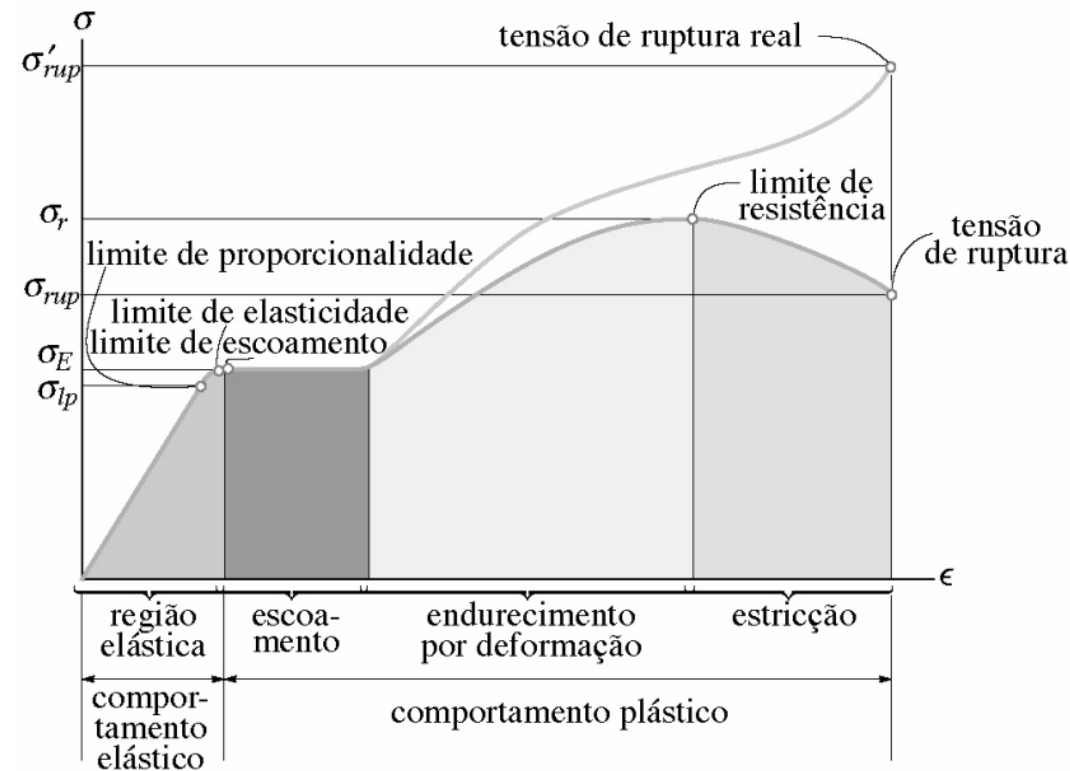
Propriedade dos Materiais - Diagrama Tensão-Deformação

Máquina de tração

Corpo de prova



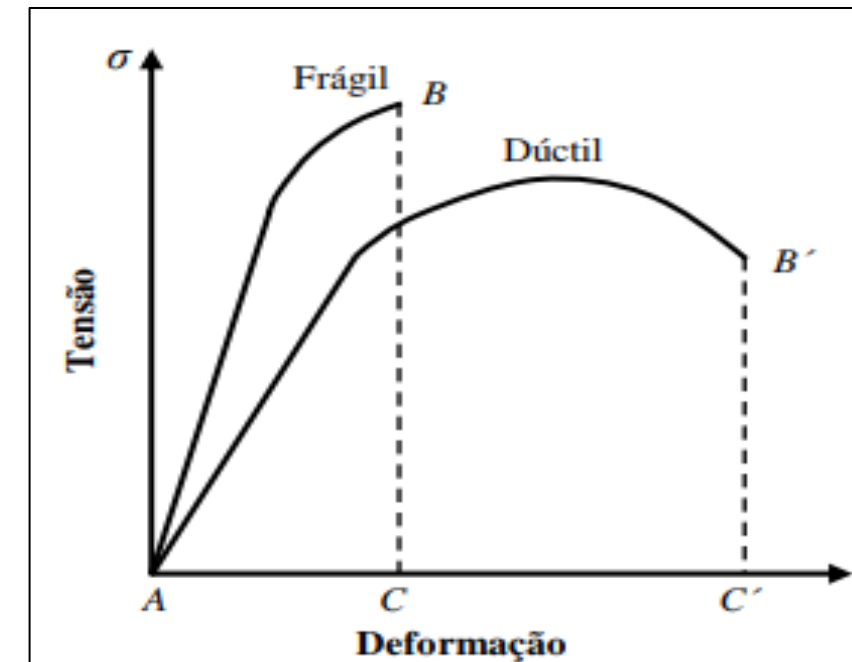
Curva tensão-deformação



Diagramas tensão-deformação convencional e real para material dúctil (aço) (sem escala)

Comportamento mecânico

- Material frágil e dúctil

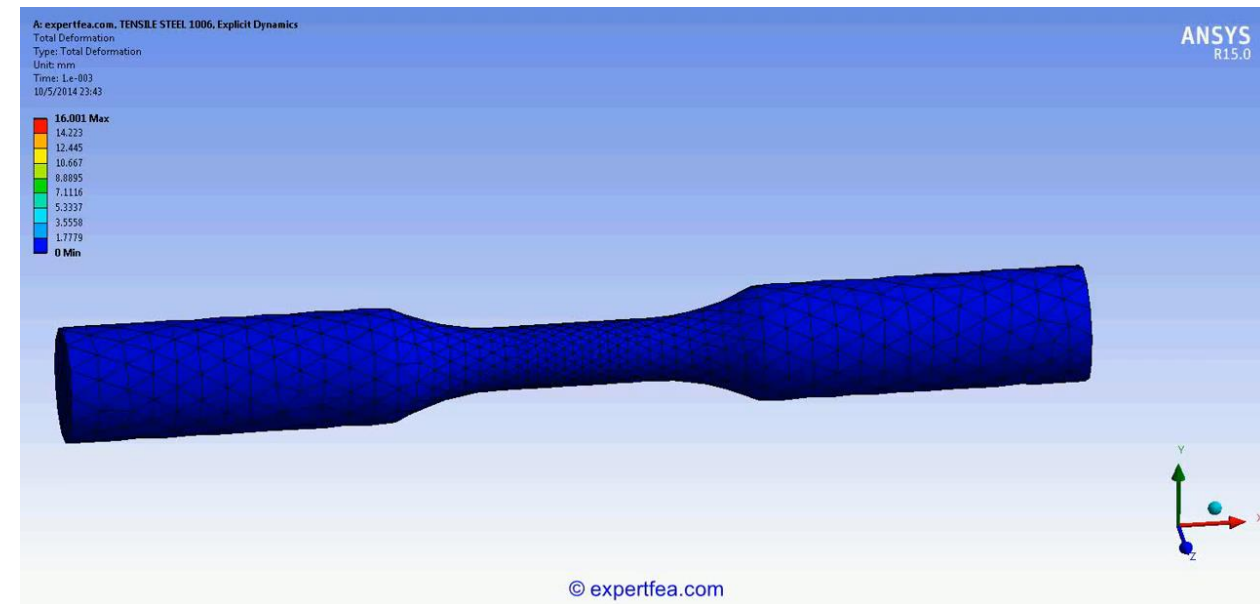


Propriedade dos Materiais - Ensaio de tração

Teste mecânico



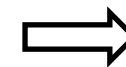
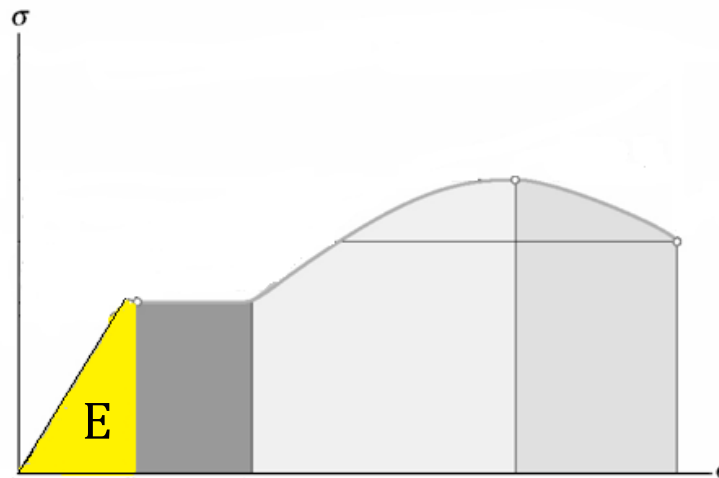
Simulação de um teste mecânico



Equações Constitutivas

- A equação constitutiva da mecânica dos sólidos é uma relação entre o estado de tensão e o estado de deformação presentes em um corpo;
- As propriedades do material é que vão definir que tensões aparecerão no corpo quando ele for deformado;

Ensaio de tração \Rightarrow



Módulo de elasticidade ou
módulo de Young

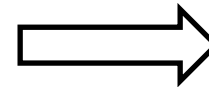
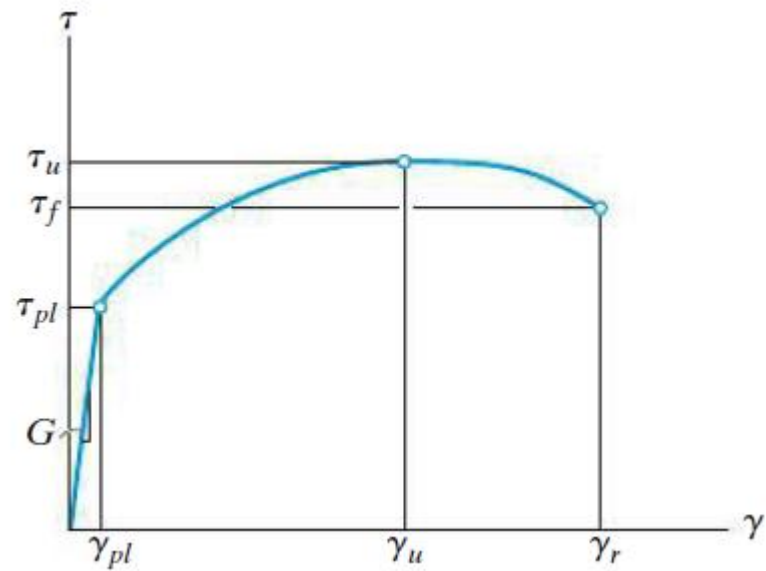
$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon}$$

Lei de Hooke

$$\sigma = E \varepsilon$$

Equações Constitutivas

Tensão de cisalhamento x deformação cisalhamento



Módulo de Elasticidade ao Cisalhamento

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}$$

Lei de Hooke para cisalhamento

$$\tau = G\gamma$$

Relações entre Tensão e Deformação

Caso mais geral 3D:

$$\{\sigma\} = [C]\{\varepsilon\}$$

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{XX} \\ \sigma_{YY} \\ \sigma_{ZZ} \\ \sigma_{YZ} \\ \sigma_{XZ} \\ \sigma_{XY} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{XX} \\ \varepsilon_{YY} \\ \varepsilon_{ZZ} \\ 2\varepsilon_{YZ} \\ 2\varepsilon_{XZ} \\ 2\varepsilon_{XY} \end{Bmatrix}$$

Relações entre Tensão e Deformação

Material isotrópico: mesmas propriedades em todas as direções.
Relação tensão-deformação é dada por 2 constantes independentes:

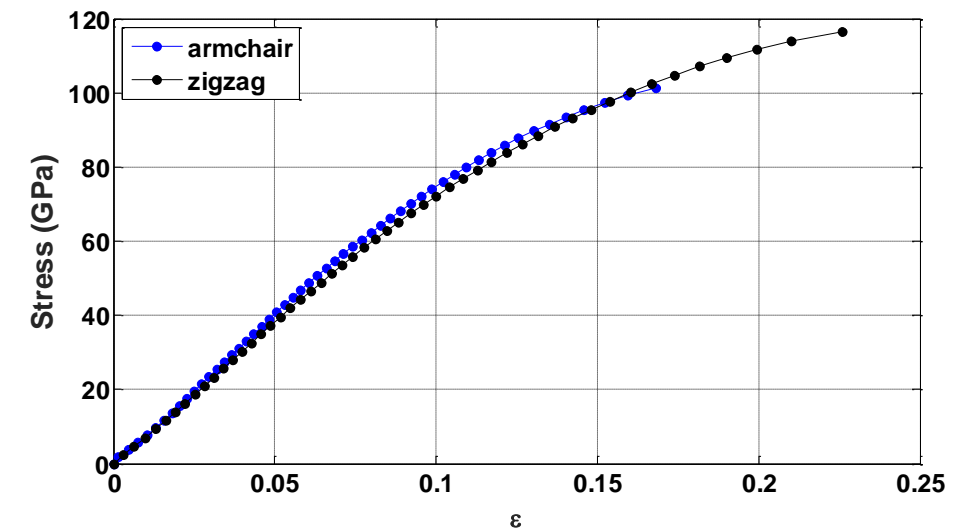
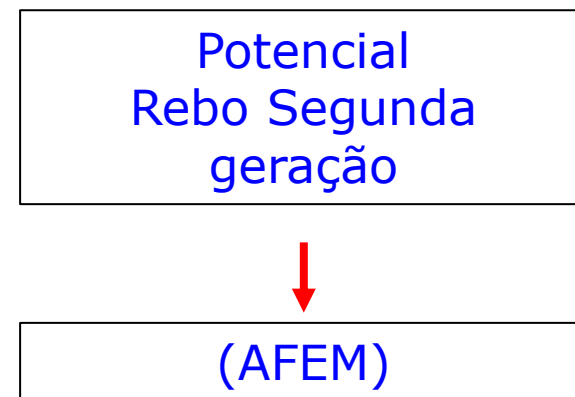
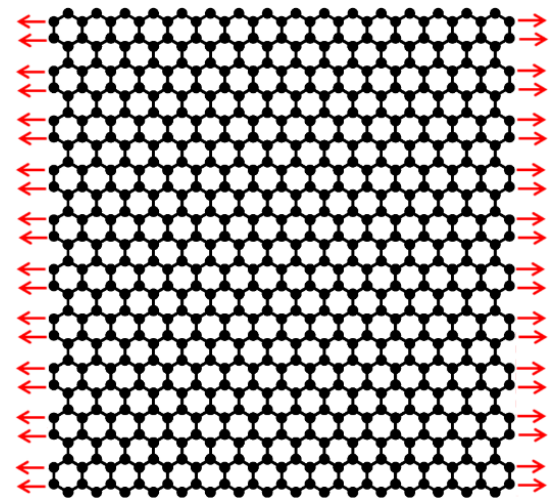
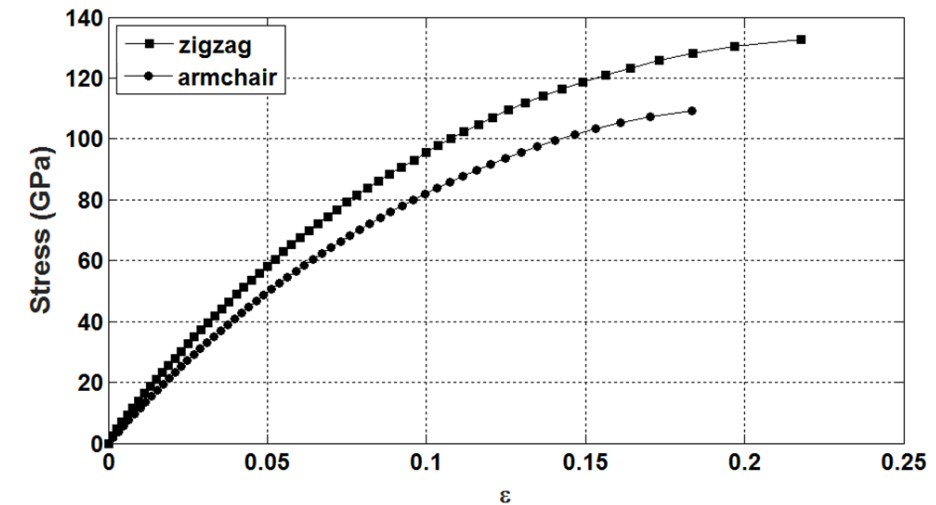
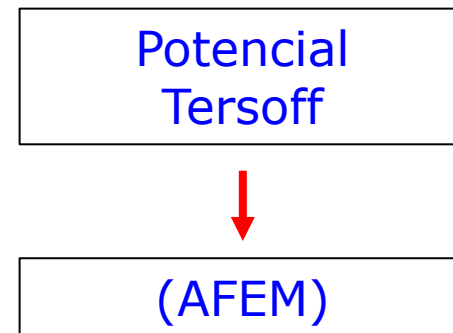
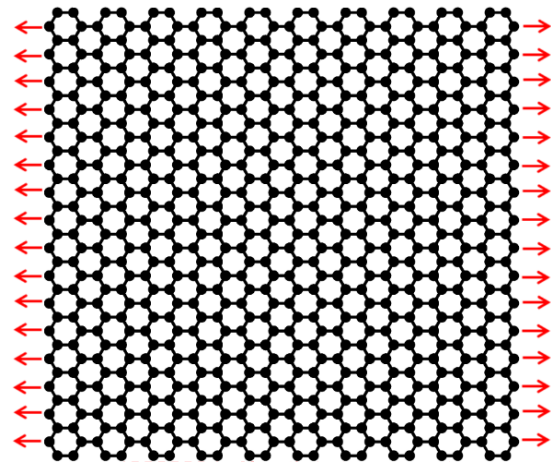
$$\begin{Bmatrix} \sigma_{XX} \\ \sigma_{YY} \\ \sigma_{ZZ} \\ \sigma_{YZ} \\ \sigma_{XZ} \\ \sigma_{XY} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{XX} \\ \varepsilon_{YY} \\ \varepsilon_{ZZ} \\ 2\varepsilon_{YZ} \\ 2\varepsilon_{XZ} \\ 2\varepsilon_{XY} \end{Bmatrix}$$

$$c_{44} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$$

Grafeno: Diagrama Tensão – Deformação usando AFEM

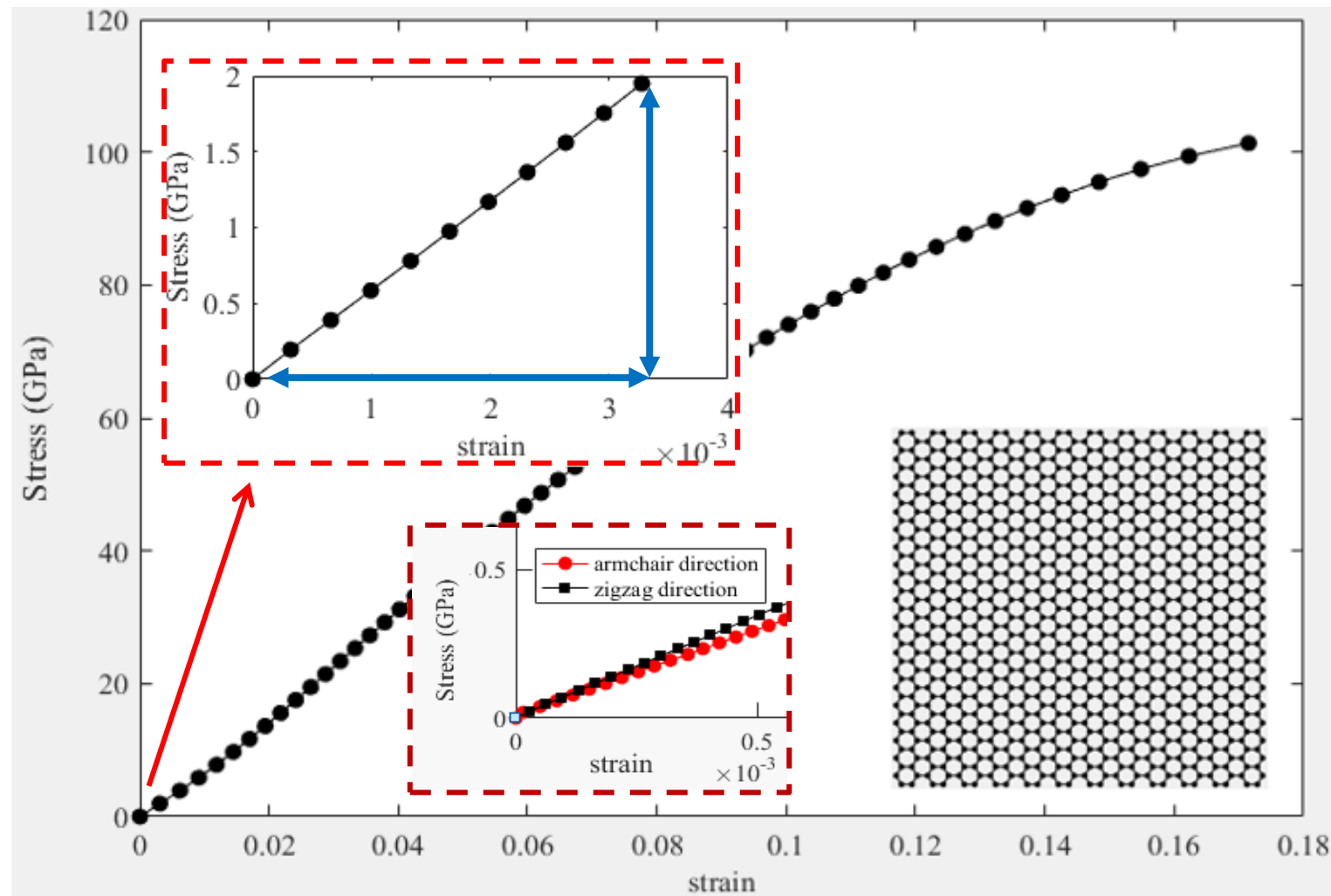
Método dos Elementos Finitos em escala atômica (AFEM)

Direções: armchair e zigzag



Grafeno

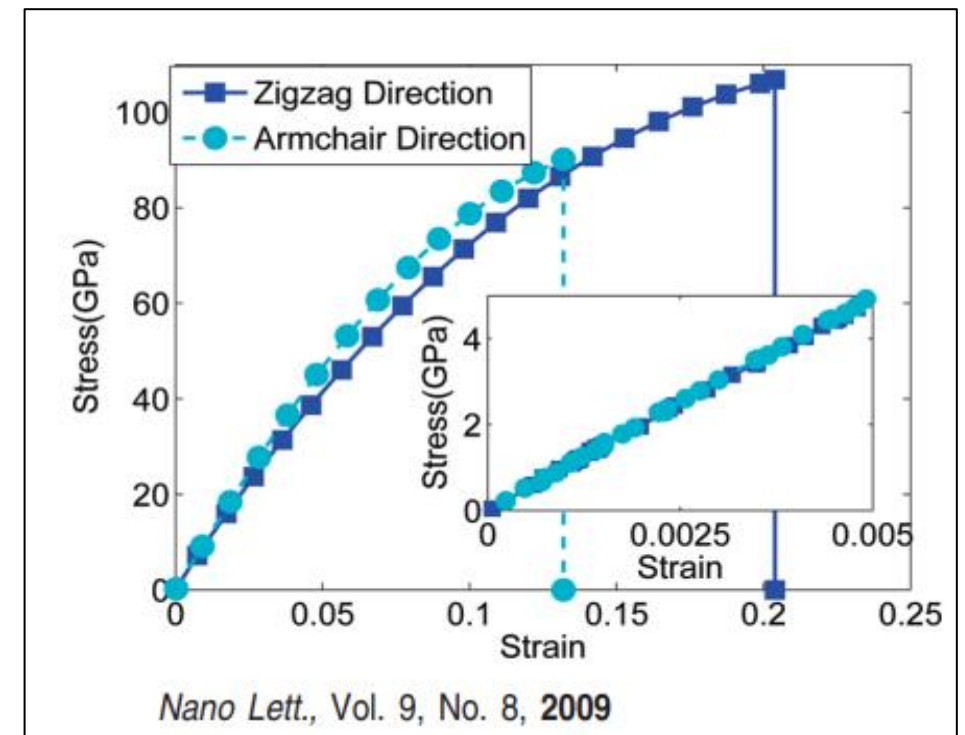
Diagrama tensão x deformação



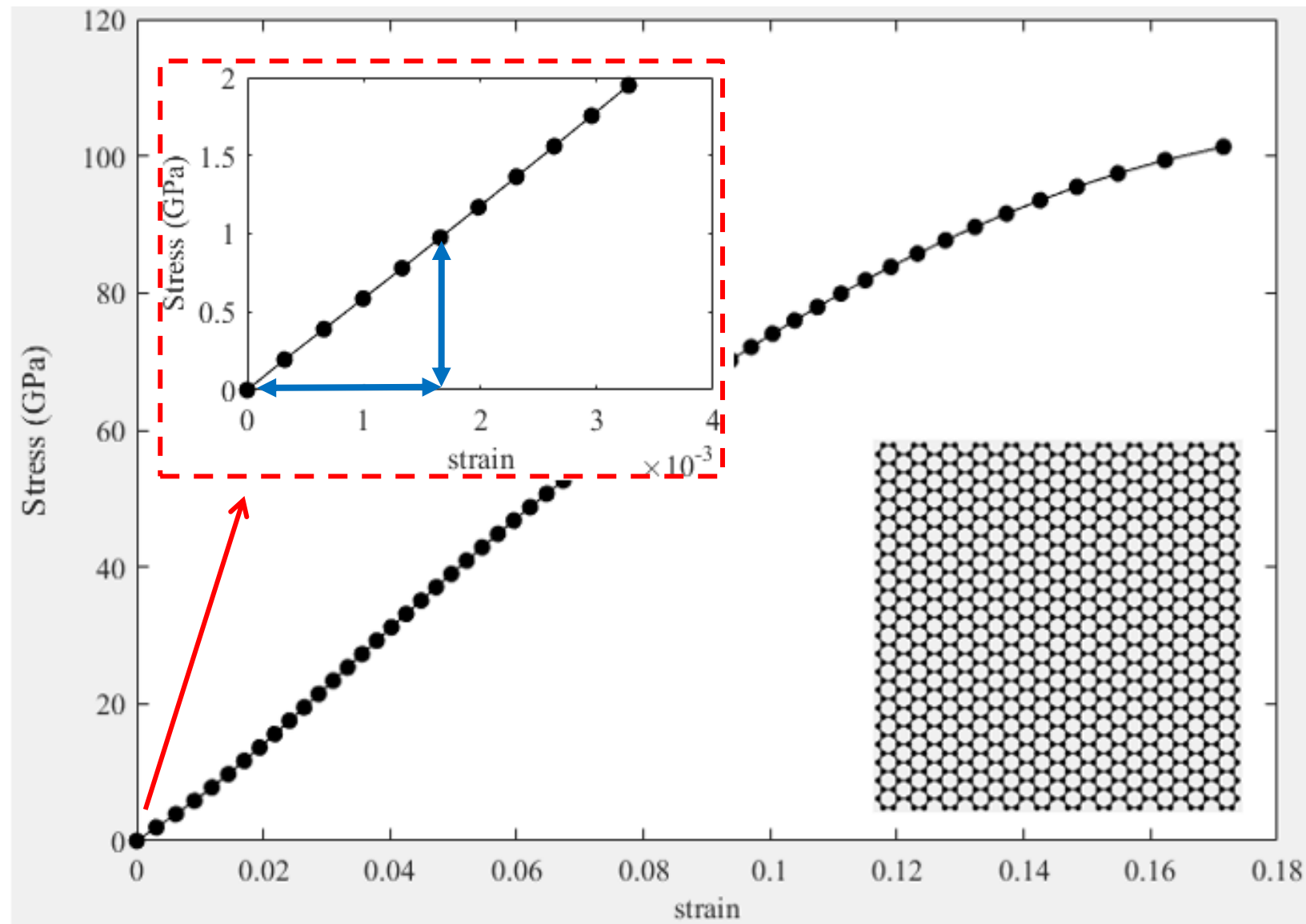
Módulo de elasticidade

$$E = \frac{\text{stress}}{\text{strain}}$$

MD - Zhao 2009



Grafeno



Módulo de elasticidade

$$E = \frac{\text{stress}}{\text{strain}} \quad E_1 = \frac{\sigma_1}{\varepsilon_1}$$

$$E = \frac{\frac{\sigma_1}{\varepsilon_1} + \frac{\sigma_2}{\varepsilon_2} + \frac{\sigma_3}{\varepsilon_3} + \frac{\sigma_4}{\varepsilon_4} + \frac{\sigma_5}{\varepsilon_5} + \frac{\sigma_6}{\varepsilon_6}}{6}$$

Bibliografia

Daryl L. Logan. "A First Course in the Finite Element Method," CL Engineering, pp. 696, 2001.

The Finite Element Method:A Practical Course - G. R. Liu e S. S. Quek

Notas de aula: Prof. Olivier de Weck e Dr. Il Yong Kim, Massachusetts Institute of Technology, 2004.

Notas de aula: Prof. William Martins Vicente, Unicamp, 2020.

Notas de aula: Prof. Euclides de Mesquita Neto, Unicamp, 2020.

LabFEM 1 - 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>



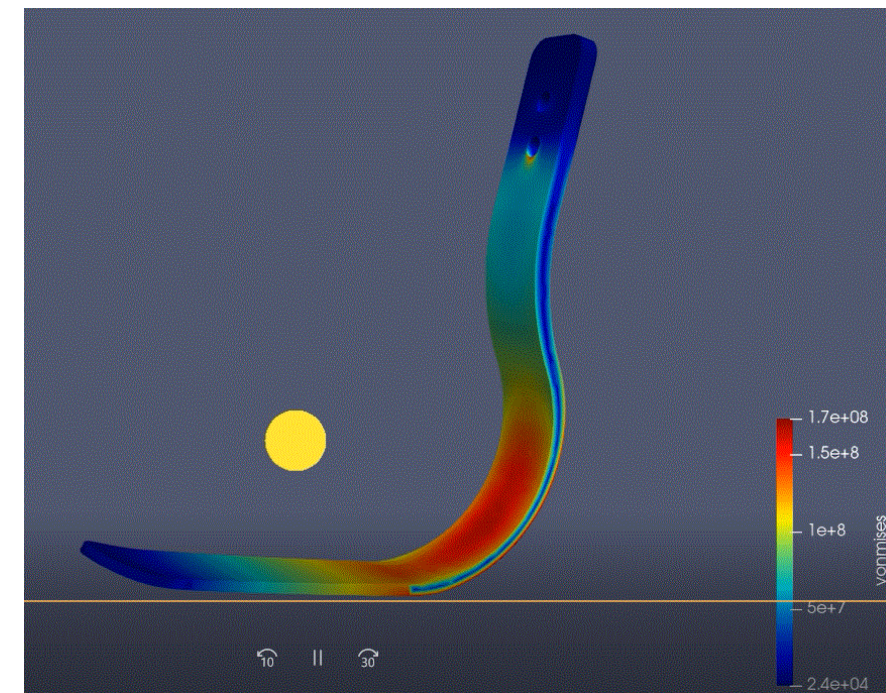
Flex-Run - Össur



Cheetah Xtend - Össur

Objetivos

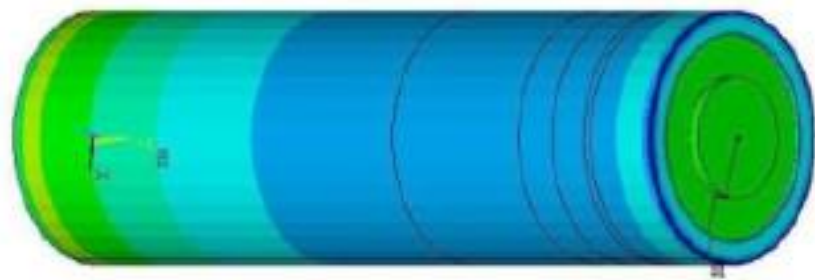
- Aplicar o método de elementos finitos (MEF) usando o software Elmer;
- Verificar as tensões e deslocamentos para um dado carregamento;



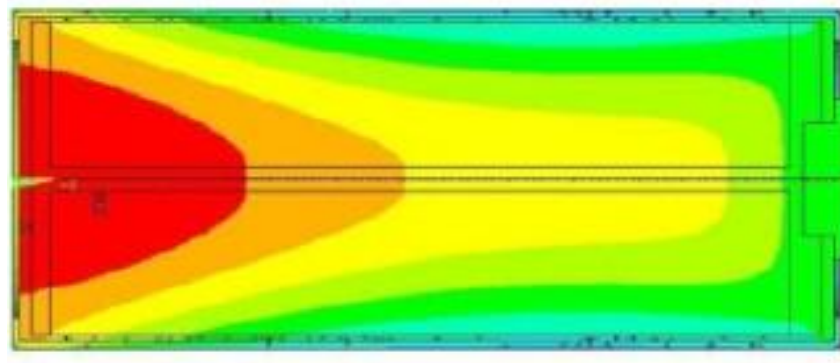
Distribuição de temperatura numa bateria de íon-Li

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.