



PLANO DE ENSINO – 2022/2

IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:				
CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	TURMA	Nº DE HORAS-AULA SEMANAIS	TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS
EQA6900	Introdução à Modelagem e Simulação de Materiais	-	04	72

PROFESSOR(ES) MINISTRANTE(S)	HORÁRIO DE ATENDIMENTO
Sergio Yesid Gómez Gonzalez (sergio.gomez@ufsc.br)	Segunda 13-16 : Sala E-301 - EQA

PRÉ-REQUISITO(S)	
CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA
EQA5415 ou EMC5425 <i>eh</i> INE5201 <i>eh</i> MTM3104	Fenômenos de Transferência I <i>ou</i> Fenômenos de Transportes <i>eh</i> Introdução à Ciência de Computação <i>eh</i> Cálculo 4

CURSO(S) PARA O(S) QUAL(IS) A DISCIPLINA É OFERECIDA
ENGENHARIA QUÍMICA
ENGENHARIA DE ALIMENTOS
ENGENHARIA DE MATERIAIS

EMENTA
Introdução nas abordagens de modelagem e simulação, abrangendo modelos e técnicas computacionais decorrentes das escalas onde se estudam os materiais; simulações na macroescala, métodos contínuos e dinâmica molecular. As diferentes abordagens permitem projetar processos, materiais e estruturas, para tornar os materiais mais ecológicos, mais leves, mais fortes, mais eficientes energeticamente, entre outros projetos.

OBJETIVOS
GERAL: O objetivo principal desta disciplina é fornecer elementos teóricos e computacionais apropriados para abordar desafios típicos na área multidisciplinar dos materiais focando em três escalas diferentes; macro, contínuo e molecular. Serão discutidas as bases teóricas da obtenção de modelos (equações), trabalhando estudos de caso ao longo do curso, a modo de contextualizar as escalas, e aprimorar o entendimento através da aplicação dos métodos para obter soluções (simulação). ESPECÍFICOS: Ao final do semestre o aluno deverá ser capaz de: (a) Entender os conceitos básicos de modelagem e simulação em materiais, entendendo as diferenças e o porque das diferentes abordagens dependendo da escala e equacionamento disponível. (b) Formular e resolver problemas usando balanços de massa, energia, e implementar soluções usando formulações empíricas, incluindo o uso de software de sistemas integrados de processo. (c) Formular e resolver problemas usando abordagens de discretização e solução de equações diferenciais ordinárias e parciais, incluindo a sua implementação utilizando software.

(d) Formular e resolver problemas simples usando noções de dinâmica molecular para o cálculo de propriedades.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO	H/A
1 – Modelagem e Simulação em Materiais a) Definições e conceitos básicos	4
2 - Abordagem Macro a) Definições e conceitos b) Tipos de Modelos c) Implementação	20
3 – O contínuo a) Definições e conceitos b) Tipos de Modelos c) Diferencias Finitas d) Elementos Finitos e) Volumes Finitos f) Implementação	22
4 – Dinâmica Molecular a) Definições e conceitos b) Tipos de Modelos c) Implementação	20
5 – Outros Atividades Avaliativas	6

Aula	Conteúdo
1 25/08 2h	Introdução à Disciplina
2 30/08 2h	Modelagem através de Balanços de Massa
3 01/09 2h	Modelagem através de Balanços de Energia
4 06/09 2h	Tipos de Modelos e sua Relação com as Escalas
5 08/09 2h	Implementação / Solução Computacional (Modelagem Empírica)
6 13/09 2h	Implementação / Solução Computacional (Simulação Flowsheet)
7	Estudo de Caso

15/09 2h	
8 20/09 2h	Estudo de Caso
9 22/09 2h	Atividade Avaliativa
10 27/09 2h	Princípios de modelagem do contínuo
11 29/09 2h	Tipos de Equações e uso de modelos contínuos estabelecidos
12 04/10 2h	Diferenças Finitas
13 06/10 2h	Elementos Finitos
14 11/10 2h	Volumes Finitos
15 13/10 2h	Implementação / Solução Computacional
16 18/10 2h	Implementação / Solução Computacional
17 20/10 2h	Estudo de Caso
18 25/10 2h	Estudo de Caso
19 27/10 2h	Atividade Avaliativa
20 01/11 2h	Introdução à Dinâmica Molecular
21 03/11 2h	Modelos e abordagens
22 08/11 2h	Implementação / Solução Computacional
23 10/11 2h	Implementação / Solução Computacional
24 17/11 2h	Caso de Estudo
25	Caso de Estudo

22/11 2h	
26 24/11 2h	Atividade Avaliativa
27 29/11 2h	Fechamento da Disciplina
28 01/12 2h	Correção das atividades e e divulgação da nota final
29 06/12 2h	REC
30 24/24	Início Recesso Escolar

METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

As aulas serão expositivas, com a utilização de quadro, recursos audiovisuais e de recursos computacionais:

Por favor trazer o próprio computador com os programas instalados para fazer as atividades. Em aula se indicara como instalar ou se fornecerão links-instruções. Dúvidas sobre o conteúdo exposto em sala de aula e das atividades e/ou poderão ser atendidas também pelo professor sendo possível combinar horário por e-mail

Atividade Individual: Como mostrado no plano, não teremos provas, mas sim atividades avaliativas, a diferença é que serão colocados todos os conteúdos e marcação é destinada a resolver dúvidas com o professor da atividade individual de fechamento e para ser entregue via moodle antes da seguinte aula conforme será colocado no dead-line do link. O calendário que marca fechamento da atividade, se faram os esclarecimentos necessários que o aluno considere pertinente para a execução da atividade. As atividades deve ser enviadas através do moodle, bem escrito e em formato de relatório anexando os scripts ou arquivos gerados

METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

Para avaliação serão contempladas 3 atividades avaliativas, será desenvolvido um projeto ao longo do semestre e serão realizados exercícios. Os critérios de avaliação são apresentados abaixo:

AVALIAÇÃO	PESO (%)
Atividade 1	25
Atividade 2	25
Atividade 3	25
Atividade em Aula	25

A média final será calculada como segue:

$$\text{Média} = (\text{Atividade 1} + \text{Atividade 2} + \text{Atividade 3} + \text{Atividades em Aula})/4$$

$$\text{Atividades em Aula} = (\sum \text{Atividades})/\#\text{Atividades}$$



A nota de atividades será calculada por média aritmética simples de todas as atividades feitas. Será considerado aprovado o estudante que obtiver média maior ou igual a 6,0.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

As notas de aula, apresentações, slides, vídeos, referências, entre outros, será disponibilizado pelo professor posteriormente, garantindo o acesso do estudante a material adequado.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

- R.L. Burden, J.D. Faires, A.M. Burden (2015): "Numerical Analysis"
- C. Johnson (2012): "Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method"
- D. Frenkel, B. Smit (2001): "Understanding Molecular Simulation"
- M.J. Buehler (2008): "Atomistic Modeling of Materials Failure"
- Allen and Tildesley: "Computer simulation of liquids"
- D. C. Rapaport (1996): "The Art of Molecular Dynamics Simulation"
- J.M. Haile (Wiley, 1992), "Molecular dynamics simulation"

Assinatura do Professor

Assinatura do Chefe do
Departamento