



PLANO DE ENSINO – 2023/1

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>	Fenômenos de Transferência I <i>ou</i> Fenômenos de Transportes <i>eh</i>
INE5201 <i>eh</i>	Introdução à Ciência de Computação <i>eh</i>
MTM3104	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 07/03 2h	Introdução à Disciplina - Modelos e sua Relação com as Escalas
2 09/03 2h	Modelagem Balanços de Materiais
3 14/03 2h	Modelagem de Sistemas com Geração
4 16/03 2h	Modelagem Balanços de Energia
5 21/03 2h	Simulação Flowsheet
6 28/03 2h	Implementação e Solução Computacional
7	Estudo de Caso

30/03 2h	
8 04/04 2h	Estudo de Caso
9 06/04 2h	Apresentações I
10 11/04 2h	Apresentações II
11 13/04 2h	Princípios de modelagem do contínuo
12 18/04 2h	Tipos de Equações e uso de modelos contínuos estabelecidos
13 20/04 2h	Modelo de Equações Diferenciais e Métodos de Discretização
14 25/04 2h	Diferenças Finitas
15 27/04 2h	Elementos Finitos / Volumes Finitos
16 02/05 2h	Implementação e Solução Computacional
17 04/05 2h	Implementação e Solução Computacional
18 09/05 2h	Estudo de Caso
19 11/05 2h	Estudo de Caso
20 16/05 2h	Apresentações I
21 18/05 2h	Apresentações II
22 23/05 2h	Introdução à Dinâmica Molecular
23 25/05 2h	Modelos e abordagens
24 30/05 2h	Implementação e Solução Computacional
25	Caso de Estudo



01/06 2h	
25 06/06 2h	Caso de Estudo
26 13/06 2h	Apresentações
27 15/06 2h	Apresentações - Encerramento da Disciplina
28 22/06 2h	Correção das atividades e e divulgação da nota final
29 06/07 2h	REC
30 11/07	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 resolvendo casos de estudo, para a realização destes você contara com duas aulas consideradas dentro deste plano, você também pode resolver dúvidas com o professor antes do fechamento e serão entregues 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 (%)
Caso 1	25
Caso 2	25
Caso 3	25
Atividades Complementares	25

A média final será calculada como segue:

$$\text{Média} = (\text{Caso 1} + \text{Caso 2} + \text{Caso 3} + \text{Ativ. Comp.})/4$$



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

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