



### PLANO DE ENSINO – 2024/2

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
<p>GERAL:</p> <p>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).</p> <p>ESPECÍFICOS:</p> <p>Ao final do semestre o aluno deverá ser capaz de:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>(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.</li><li>(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.</li><li>(c) Formular e resolver problemas usando abordagens de discretização e solução de equações diferenciais ordinárias e parciais, incluindo a sua implementação utilizando software.</li></ul>

(d) Formular e resolver problemas simples usando noções de análise de ciclo de vida.

<b>CONTEÚDO PROGRAMÁTICO</b>	<b>H/A</b>
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	26
3 – O contínuo a) Definições e conceitos b) Tipos de Modelos c) Diferencias Finitas d) Implementação	22
4 – Análise de Ciclo de Vida a) Definições e conceitos b) Tipos de Modelos c) Implementação	16
5 – Outros Atividades Avaliativas	6

<b>Aula</b>	<b>Conteúdo</b>
1 10/09 2h	<b>Introdução à Disciplina - Modelos e sua Relação com as Escalas – Modelagem usando Balanços Gerais</b>
2 12/09 2h	Modelagem Balanços de Materiais
3 17/09 2h	Modelagem de Sistemas com Geração
4 19/09 2h	Modelagem Balanços de Energia
5 24/09 2h	Modelagem Balanços Materiais e de Energia Acoplados
6 26/09 2h	Simulação Flowsheet – Otimização
7 01/10 2h	Aplicação Prática 1

8 03/10 2h	Aplicação Prática 2
9 08/10 2h	<b>Prova 1</b>
10 10/10 2h	<b>Estudo de Caso 1</b>
11 15/10 2h	<b>Entrega e Apresentações Estudo de Caso 1</b>
12 17/10 2h	Princípios de modelagem do contínuo
13 22/10 2h	Equações e uso de modelos contínuos estabelecidos
14 24/10 2h	Solução de Equações Usando Métodos de Discretização
15 29/10 2h	Introdução a Python 1
16 31/10 2h	Introdução a Python 2
17 05/11 2h	Métodos de Euler e Runge-Kutta
18 07/11 2h	Diferenças Finitas
19 12/11 2h	Aplicação Prática 1
20 14/11 2h	Aplicação Prática 2
21 19/11 2h	<b>Prova 2</b>
22 21/11 2h	<b>Estudo de Caso 2</b>
23 26/11 2h	<b>Entrega e Apresentações Estudo de Caso 2</b>
24 28/11 2h	Introdução ao análise de ciclo de vida
25 03/12 2h	Aplicação 1

26 05/12 2h	Aplicação 2
27 10/12 2h	<b>Prova 3</b>
28 12/12 2h	<b>Caso de Estudo 3</b>
29 17/12 2h	<b>Entrega e Apresentação Caso 3</b>
30 19/12 2h	Encerramento da Disciplina
31 20/12 2h	Divulgação da nota final
32 21/12	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

#### 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	20
Prova 1	20
Caso 2	15
Prova 2	15
Caso 3	15
Prova 3	15

A média final será calculada como segue:

$$\text{Média} = (\text{Caso 1} + \text{Prova 1}) \times 0.2 + (\text{Caso 2} + \text{Prova 2} + \text{Caso 3} + \text{Prova 3}) \times 0.15$$

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