



GOVERNO DO ESTADO DO AMAZONAS
RELATÓRIO TÉCNICO DE BOLSISTA

PROGRAMA FAPEAM	PIBIC - PAIC 2013/2014		
N. EDITAL FAPEAM	Resolução 022/2011 - Decisão 121/2013		
MODALIDADE DE BOLSA	Iniciação Científica	NÍVEL DA BOLSA	() NÍVEL A () NÍVEL B () NÍVEL C (X) NÍVEL ÚNICO
TIPO DE RELATÓRIO	(X) FINAL		
PERÍODO A QUE SE REFERE ESSE RELATÓRIO:	01/08/2013 à 31/07/2014		
É OBRIGATÓRIO PREENCHIMENTO DO PROGRAMA, BOLSA E NÍVEL.			

1. DADOS DO BOLSISTA (não omita ou abrevie nomes)

NOME:	Julio da Silva Santos				
E-MAIL:	Juliomf2015@gmail.com				
TELEFONE:		CELULAR:	(92)9301-4501	FAX:	

2. PROJETO DE PESQUISA EM QUE O BOLSISTA DESENVOLVE ATIVIDADES

TÍTULO DO PROJETO:	Modelagem de Fluidos Clássicos via Métodos Computacionais
TÍTULO DO PLANO DE TRABALHO DO BOLSISTA:	Cronograma de Atividades
INÍCIO:	01/08/2013
TÉRMINO:	31/07/2014

3. DADOS DO COORDENADOR / ORIENTADOR

NOME:	Dilcelino de Souza Bruce				
E-MAIL:	brucedilcelino@gmail.com				
TELEFONE:		CELULAR:	(92)9258-2058	FAX:	

4. INSTITUIÇÃO ONDE O BOLSISTA DESENVOLVE ATIVIDADES

INSTITUIÇÃO:	UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS				
UNIDADE E DEPARTAMENTO:	INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA				
ENDEREÇO:	RUA NOSSA SENHORA DO ROSÁRIO N°3863 TIRADENTES				
TELEFONE:	(92) 3521-3603	FAX:			



GOVERNO DO ESTADO DO AMAZONAS

5. INFORMAÇÕES DA BOLSA CONCEDIDA					
INÍCIO:	01/08/2013	TÉRMINO:	31/07/2014	PERÍODO CONCEDIDO (MESES):	12 meses
ALTERAÇÕES:	<input type="checkbox"/> BOLSA CANCELADA A PARTIR DE: / /				
	<input type="checkbox"/> SUBSTITUIÇÃO DO BOLSISTA (NOME) A PARTIR DE : / /				
	<input type="checkbox"/> BOLSA RENOVADA A PARTIR DE: / /				
	<input checked="" type="checkbox"/> NÃO HOUVE ALTERAÇÕES				
JUSTIFIQUE A ALTERAÇÃO:					

6. OBJETIVOS PROPOSTOS NO PLANO DE TRABALHO (máximo 15 linhas- não alterar formatação)
<ul style="list-style-type: none">- Realizar a modelagem de Fluidos Clássicos aplicando Simulação Computacional de MC e DM.- Comparar a temperatura de condensação com dados experimentais;- Investigar a influencia de potenciais nos resultados de grandezas termodinâmicas;- Comparar os resultados das grandezas termodinâmicas pelos dois métodos de simulação.

7. RESULTADOS OBTIDOS (máximo 30 linhas - não alterar formatação)
Descreva os resultados obtidos e analise-os em função dos objetivos propostos em seu plano de trabalho



GOVERNO DO ESTADO DO AMAZONAS

A simulação computacional é um método de caráter complementar e muito alternativo aos métodos convencionais de fazer ciência, experimental e teórica, e também tem sido um forte impacto em todos os campos da ciência. A simulação computacional, também, tem como objetivo resolver os modelos teóricos em sua total complexidade, mediante a revolução numérica das equações envolvidas, fazendo uso intensivo dos computadores. Mediante um bom modelo do sistema físico, não só podemos reproduzir experimentos de laboratório, como podemos ir mais além, uma vez que podemos variar livremente os parâmetros usados, isso permite provar (ou não) modelos teóricos existentes dentro de um alcance de parâmetros impossíveis de serem alcançados até o momento, resolvendo assim o elo entre explicações teóricas e observações. Neste trabalho estudamos como fluido clássico o gás argônio modelado num sistema de 864 partículas que interage através do potencial de Lenard Jones [Lennard-Jones, J. E.; Ingham, A. E. *Proc Roy Soc A* 1925, 107, 636.] e que obedece as equações clássicas de movimento. Os cálculos foram realizados por um processador Intel Core i5, com intuito de simular via dinâmica molecular o comportamento do gás à uma densidade de $1,374 \text{ gcm}^{-3}$. A configuração estável cúbica de face centrada (fcc) foi usada e o tamanho da caixa de simulação foi de $L=33.9 \text{ \AA}$ e o raio de corte de 7.6 \AA . A partir da simulação de dinâmica molecular, e usando um potencial proposto por Rhaman modelado no ensemble micro canônico (NVE) discutimos os resultados. Na construção do diagrama de fase: energia total por número de partículas versus temperatura nos indicou uma transição de fase sólido-líquido à 87.3 K o que concorda com o valor da temperatura de fusão experimental em torno de 83.85 K [Pahl, E.; Calvo, F.; Koř i, L.; Schwerdtfeger, P. *Angew c Chem Int Ed* 2008, 47, 8207] com erro aproximado de 3.95%.

8. PRODUÇÃO GERADA PELO PROJETO, COM A PARTICIPAÇÃO DO BOLSISTA.

[Indicar somente a produção gerada a partir da pesquisa apoiada.](#)

8.1. Produção Bibliográfica	Quantidade	
	Nacional	Internacional
Artigo completo publicado, aceito ou submetido em periódicos científicos especializados (nacional ou internacional) com corpo editorial.	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Livros e capítulos publicados com corpo editorial e ISBN	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Organização e editoração de livros e periódicos com corpo editorial	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Comunicações em anais de congressos e periódicos	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Resumo publicado em eventos científicos	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Texto em jornal ou revista (magazine)	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Trabalho publicado em anais de evento	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Partitura musical (canto, coral, orquestra, outra)	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>



GOVERNO DO ESTADO DO AMAZONAS

Tradução de livros, artigos, ou outros documentos com corpo editorial	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Prefácio, posfácio, apresentação ou introdução de livros, revistas, periódicos ou outros meios.	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
Outra: _____	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>

LISTAR COM REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA COMPLETA E INCLUIR CÓPIA (CAMPO ILIMITADO)

--

8.2. Produção Cultural	Quantidade
Apresentação de obra artística (coreográfica, literária, musical, teatral, outra)	<input type="text" value="0"/>
Exposição de artes visuais (pintura, desenho, cinema, escultura, fotografia, gravura, instalação, televisão, vídeo ou outra)	<input type="text" value="0"/>
Arranjo musical (canto, coral, orquestral, outro)	<input type="text" value="0"/>
Composição musical (canto, coral, orquestral, outro)	<input type="text" value="0"/>
Sonoplastia (cinema, música, rádio, televisão, teatro ou outra)	<input type="text" value="0"/>
Apresentação em rádio ou TV (dança, música, teatro ou outra)	<input type="text" value="0"/>
Curso de curta duração	<input type="text" value="0"/>
Obra de artes visuais	<input type="text" value="0"/>
Programa de rádio ou TV	<input type="text" value="0"/>
Outra: _____	<input type="text" value="0"/>

LISTAR, INFORMAR QUAL TIPO DE PRODUÇÃO E SE POSSÍVEL INCLUIR CÓPIA (CAMPO ILIMITADO)

--

8.3. Produção Técnica ou Tecnológica	Quantidade
Software (computacional, multimídia ou outro) com/sem registro/patente	<input type="text" value="0"/>
Produto (piloto, projeto, protótipo ou outro) com/sem registro/patente	<input type="text" value="0"/>
Processo (analítico, instrumental, pedagógico, processual, terapêutico ou outro) com/sem registro/patente	<input type="text" value="0"/>



GOVERNO DO ESTADO DO AMAZONAS

Trabalho técnico (assessoria, consultoria, parecer, elaboração de projeto, relatório técnico, serviços na área da saúde ou outro)	<input type="text" value="0"/>
Mapa, carta geográfica, fotograma, aerofotograma, outro.	<input type="text" value="0"/>
Maquete	<input type="text" value="0"/>
Desenvolvimento de material didático ou instrucional	<input type="text" value="0"/>
Organização e editoração de livros, anais, catálogo, coletânea, periódico, enciclopédia ou outro	<input type="text" value="0"/>
Outra: _____ -	<input type="text" value="0"/>

LISTAR, INFORMAR QUAL TIPO DE PRODUÇÃO E SE POSSÍVEL INCLUIR CÓPIA (CAMPO ILIMITADO)

--

8.4. Difusão de Ciência e Tecnologia – Participação em Eventos

Nome do Evento	DATA	APRESENT OU TRABALHO	TIPO
Seminário de agroecologia		() SIM () NÃO	() Palestra () Poster () Outro
Congresso de iniciação científica da UFAM		() SIM () NÃO	() Palestra () Poster () Outro
	/ /	() SIM () NÃO	() Palestra () Poster () Outro
	/ /	() SIM () NÃO	() Palestra () Poster () Outro
	/ /	() SIM () NÃO	() Palestra () Poster () Outro

LISTAR E INCLUIR CÓPIA DO CERTIFICADO (CAMPO ILIMITADO)

--

9. NO GERAL, EM TERMOS DE SUA CAPACITAÇÃO, AMADURECIMENTO E CRESCIMENTO PROFISSIONAL, COMO VOCÊ AVALIA AS ATIVIDADES DESENVOLVIDAS? (A SER RESPONDIDA PELO BOLSISTA, SE PERTINENTE À MODALIDADE DE BOLSA)



GOVERNO DO ESTADO DO AMAZONAS

9. NO GERAL, EM TERMOS DE SUA CAPACITAÇÃO, AMADURECIMENTO E CRESCIMENTO PROFISSIONAL, COMO VOCÊ AVALIA AS ATIVIDADES DESENVOLVIDAS? (A SER RESPONDIDA PELO BOLSISTA, SE PERTINENTE À MODALIDADE DE BOLSA)

- (X) ACIMA DAS EXPECTATIVAS
() CORRESPONDEU ÀS EXPECTATIVAS
() ACRESCENTOU POUCO

9.1. AVALIE, NUMA ESCALA DE 1 A 5 (SENDO 1= MUITO FRACA E 5 = EXCELENTE), OS SEGUINTE ITENS:

- (4) Orientação recebida
(4) Infra-estrutura da Instituição
(4) Relacionamento com a equipe de pesquisa
(4) Quantidade e qualidade do trabalho desenvolvido

JUSTIFIQUE SUA AVALIAÇÃO, INDICANDO OS PONTOS POSITIVOS E NEGATIVOS

A orientação recebida foi boa, os conhecimentos adquiridos com o projeto foram de extrema importância e servirão como um bom aprimoramento para a minha formação profissional. Pontos negativos que tenho a descrever é fato de ter adoecido e não ter tido a oportunidade de concluir os estudos voltados ao método de Monte Carlo e subseqüente comparações. Problemas de saúde nos quais ainda estão em tratamento. Fora esse fator não há nada a declarar, porque todas as minhas dificuldades foram sanadas.

10. PLANO DE TRABALHO E CRONOGRAMA DE DESENVOLVIMENTO DO TRABALHO PARA PRÓXIMA ETAPA – NO CASO DE RELATÓRIO TÉCNICO PARCIAL (máximo 15 linhas- não alterar formatação)

11. DESEMPENHO DO BOLSISTA. (A SER RESPONDIDO PELO ORIENTADOR/TUTOR) (máximo 10 linhas- não alterar formatação) AVALIE OS PROGRESSOS DO BOLSISTA CONSIDERANDO SUA FORMAÇÃO/CAPACITAÇÃO PROFISSIONAL

O projeto requer o conhecimento de Lagrangiana e Hamiltoniano, Mecânica Estatística, Estado Sólido, Programação em Fortran além de simulação via dinâmica molecular e monte carlo. O discente-pesquisador teve dificuldades inicialmente em Estado Sólido, mas que ao longo da pesquisa foram sanadas. O aluno mostrou dificuldade na simulação propriamente dita, mas conseguiu prática com a construção de script em shell/bash. Como o projeto é requer o aprendizado em duas técnicas de simulação e o fato de aluno-pesquisador esteve/estar comprometido de sua saúde considero como muito boa o desenvolvimento do projeto.



GOVERNO DO ESTADO DO AMAZONAS

Manaus _____ de _____ de _____.

JULIO DA SIVA SANTOS

ASSINATURA DO BOLSISTA

Manaus _____ de _____ de _____.

DILCELINO DE SOUZA BRUCE

ORIENTADOR DO BOLSISTA

É OBRIGATÓRIO O PREENCHIMENTO DE TODOS OS ITENS E DAS ASSINATURAS