



Defesa de Dissertação de Mestrado em Modelagem Computacional

DATA: 29/08/2012
HORÁRIO: 14 h
LOCAL: Sala 3501 (Instituto de Ciências Exatas/ICE)

“Ferramenta Computacional para a Definição e Geração de Estruturas Cristalinas”

Mestrando: Roberto de Carvalho Ferreira
Orientador: Prof. Marcelo Lobosco

Banca Examinadora:

Prof. Marcelo Lobosco – UFJF (Presidente/Orientador), D.Sc.
Prof. Marcelo Bernardes Vieira – UFJF (Coorientador), D.Sc.
Prof. Sócrates de Oliveira Dantas – UFJF (Coorientador), D.Sc.
Prof. Alexandre Fontes da Fonseca – UNESP, D.Sc.
Prof. Ciro de Barros Barbosa – UFJF, D.Sc.

Resumo:

A evolução dos computadores, mais especificamente no que diz respeito ao aumento de sua capacidade de armazenamento e de processamento de dados, possibilitou a construção de ferramentas computacionais destinadas à simulação de fenômenos físicos e químicos. Com isso, a realização de experimentos práticos vem, em alguns casos, sendo substituída pela utilização de experimentos computacionais, que simulam o comportamento de inúmeros elementos que compõem o experimento original. Neste contexto, podemos destacar os modelos utilizados para a simulação de fenômenos em escala atômica. A construção desses simuladores requer, por parte dos desenvolvedores, um amplo estudo e definição de modelos precisos e confiáveis. Tal complexidade se reflete, muitas vezes, em simuladores complexos, destinados a simulação de um grupo restrito de estruturas, expressos de maneira fixa, utilizando algumas formas geométricas padrões. Este trabalho propõe uma ferramenta computacional para a geração de um conjunto de estruturas cristalinas. Este conjunto é caracterizado pela organização espacial regular dos átomos que a compõe. A ferramenta é composta por a) uma linguagem de programação, que rege a criação das estruturas através da definição de um sistema cristalino e a construção de objetos a partir de funções características e operadores CSG (Constructive Solid Geometry), e b) um compilador/interpretador que analisa um código fonte escrito na linguagem, e gera a partir deste o objeto correspondente. A ferramenta oferece aos desenvolvedores um mecanismo simples que possibilita a geração de um número irrestrito de estruturas. Sua aplicabilidade é demonstrada através da incorporação de uma estrutura, gerada a partir de um código fonte, ao simulador Monte Carlo Spins Engine, criado pelo Grupo de Computação Gráfica da Universidade Federal de Juiz de Fora.