



PROGRAMA CAPES PRINT-UERJ

TEMA 5 - Ciências Exatas e Engenharias: Teoria, Experimentação, Modelagem Computacional e Aplicações

Este tema congrega de forma correlacionada projetos em Computação e em Física Teórica e Experimental. A interdisciplinaridade é uma das características mais marcantes da Física atual, relacionando-se diretamente com várias áreas da Ciência, tais como as Engenharias, Biologia e Medicina, assim como com a área de Computação. É também por meio de um diálogo interdisciplinar que a Física de Altas Energias (FAE) revolucionou o entendimento das leis do Universo. Por outro lado, o esforço tecnológico no desenvolvimento dos instrumentos tiveram impacto marcante nas últimas décadas, indo da tecnologia de consumo à comunicação, destacando-se uma verdadeira revolução no desenvolvimento de técnicas inovadoras no diagnóstico e tratamentos médicos, notadamente na Oncologia. A Física Teórica tem passado por uma revolução recente, propondo modelos para explicar desde a interação entre partículas subatômicas até o comportamento de objetos cosmológicos. Muitos destes modelos são testados em experimentos, cujos resultados os retroalimentam, permitindo descartá-los ou aperfeiçoá-los. Apesar do estado atual da compreensão das leis da Natureza, muitos aspectos encontram-se ainda sem resposta, tais como a compreensão dos mecanismos de expansão do Universo, atribuída à Energia Escura ou na incoerência das observações do movimento das galáxias com relação à estimativa de massa do Universo (a matéria escura). Atualmente, os experimentos do LHC (CERN/Suíça) e outros baseados em satélites tentam desvendar esse mistério. O volume de dados produzidos por estes experimentos são de tal ordem que é impossível tratá-los com métodos tradicionais, necessitando-se lançar mão de novas técnicas computacionais, como a inteligência artificial e processamento de alto desempenho. Experimentos tão complexos precisam ser propostos à vista de estudos prévios, envolvendo simulações e modelagens computacionais, cujas técnicas podem ser aplicadas em outras áreas, como o comportamento de partículas subatômicas ao atravessarem a matéria, com reflexos diretos no desenvolvimento de novos materiais, no diagnóstico por meio de radiação de vários tipos, no transporte de energia e de espalhamento de partículas na matéria, podendo ter impacto no desenvolvimento de novas tecnologias também na área de reatores nucleares e no estudo de efeitos físicos com grande potencial no desenvolvimento de tecnologias mais eficientes que podem ser de grande importância também para o meio ambiente.

PROJETOS VINCULADOS

Desafios Contemporâneos em Gravitação e Cosmologia

Neste projeto, estamos particularmente interessados no estudo e entendimento de problemas de ponta na área da física teórica, em particular no entendimento da física do universo primordial, incluindo a física associada ao big bang, das questões relacionadas aos chamados componentes escuros universo (energia e matéria escuras) e em problemas fundamentais da relatividade geral, como buracos negros, ondas gravitacionais, colapso gravitacional e outras possíveis extensões. O presente grupo de pesquisa, ligado ao programa de pós-graduação em física da Uerj, tem feito importantes contribuições nesse sentido e possui uma rede de colaborações internacionais ativa de longa data. o presente projeto vai permitir não só um estreitamento e aprofundamento dessas colaborações, como também, porventura a elaboração de futuros projetos de convênio, particularmente com universidades no Reino Unido, Canadá, Estados Unidos, Espanha, Portugal, Escócia, Argentina e México (tais como a UNIVERSITY OF NEWCASTLE, MCGILL UNIVERSITY, UNIVERSIDADE DE GRANADA, UNIVERSITY OF EDINBURGH, UNIVERSITÉ MONTPELLIER, UNIVERSITY OF PITTSBURGH, UNIVERSITY OF MICHIGAN, GEORGIA TECH, OBSERVATOIRE DE PARIS-MEUDON, UNIVERSITÉ PARIS MARIE CURIE, E INSTITUTE OF COSMOLOGY AND GRAVITATION) . O grupo de pesquisa nas áreas de cosmologia e gravitação do ppgf é altamente produtivo em termos de publicações de qualidade (em sua maioria qualis a), com várias orientações tanto ao nível de mestrado e doutorado e tem uma rede de colaborações internacionais ampla. Sua vinculação ao presente projeto apresenta-se de forma natural, dada a possibilidade de viabilizar as relações futuras do programa com aqueles pesquisadores e instituições internacionais e o intercâmbio de pesquisadores e alunos de ambas as instituições envolvidas. Este projeto tem como objetivo o estudo dos diversos aspectos relacionados à gravitação e à cosmologia: inflação e transições de fase no universo primordial (transições de fase em geral associadas a quebras espontâneas de simetrias), descrição de buracos negros em teorias modificadas da gravitação, emissão de ondas gravitacionais por sistemas descritos pela relatividade geral (colapso gravitacional e interações entre objetos compactos). Esperamos obter um aprofundamento do conhecimento nessa área da física, atraindo e ampliando o interesse de outros grupos de pesquisa para essa área e a visibilidade de nossas publicações tanto ao nível nacional e, principalmente, ao nível internacional.

Efeitos I-Calóricos

O estudo dos efeitos i-calóricos, onde i representa um parâmetro externo da qual a entropia depende, como por exemplo, tensão, campo magnético e/ou campo elétrico, apresenta um grande interesse tanto do ponto de vista tecnológico quanto do ponto de vista teórico-acadêmico.

Do ponto de vista tecnológico estes efeitos apresentam como sua principal aplicação, uma alternativa ecológica e mais eficiente à refrigeração convencional.

Do ponto de vista teórico-acadêmico, os efeitos i-calóricos apresentam um grande potencial para a investigação de propriedades físicas fundamentais dos materiais. O grupo de pesquisa em magnetismo da Uerj tem realizado relevantes contribuições para o tema, além de manter importantes colaborações internacionais.

Com este projeto pretendemos ampliar estas colaborações. Este projeto pretende de forma geral desenvolver modelos para descrever as propriedades física fundamentais de diversos materiais que apresentam os efeitos i-calóricos, como por exemplo, o efeito Magnetocalórico, eletrocalórico e barocalórico, ou a combinação desses efeitos nos chamados efeitos multicalóricos.

Nossos modelos utilizam a aproximação de campo médio e incluem as interações fundamentais para descrever as propriedades de interesse, por exemplo, com relação as propriedades magnéticas nossos modelos incluem interações como, interação de troca, Zeeman e campo elétrico cristalino para descrever os materiais com magnetismo localizado.

Este projeto vincula as instituições: Ameslab (EUA) e University of Denmark.

Física de Altas Energias no Âmbito da Colaboração CMS (Compact Muon Solenoid) do Cern e as Tecnologias Associadas da Engenharia e Computação

A física de altas energias (FAE) é uma área na qual todos os experimentos em operação ou em planejamento são construídos mediante um esforço internacional de dezenas de países. Dada a complexidade dos experimentos e o espectro de tópicos disponíveis para estudo, envolve igualmente diversas áreas da ciência: no planejamento, construção e operação dos experimentos (física, engenharias, computação, etc.); nos desdobramentos das tecnologias desenvolvidas nesses experimentos (medicina, etc).

É um fato conhecido que o grande colisor de hádrons (LHC) do CERN é o maior e mais complexo instrumento científico já construído. O grupo de FAE da Uerj tem várias décadas de experiência em colaborações internacionais e está envolvido com o experimento CMS do CERN há mais de 10 anos. A parceria aqui estabelecida visa que o grupo de física intensifique sua participação nos experimentos, mas também busque treinamento e formação de recursos humanos em nível de pós-graduação em novas tecnologias na área de eletrônica, nanotecnologia (detectores) e ciência da computação, muitas vezes inexistentes no mercado. O volume de dados produzidos (da escala de exabytes) precisa ser processado utilizando o que há de mais moderno em computação de alta performance, computação paralela, inteligência computacional e aprendizado de máquina.

Este projeto procura dar suporte às atividades do grupo de FAE da Uerj junto ao CMS/CERN e expandir as atividades dos PPGs parceiros, contribuindo para a intensificação das ações de internacionalização dos mesmos.

A colaboração entre os PPGs aqui citados permitirá aprofundar a participação da Uerj no CMS, criando condições para o engajamento em projetos de pesquisa e desenvolvimento nas áreas de eletrônica, detectores, computação e de pesquisa em física, explorando as sinergias existentes entre essas áreas no que diz respeito à área de FAE.

É previsto o desenvolvimento de detectores ultrarrápidos utilizando técnicas de nanofabricação e da eletrônica associada, métodos inovadores em aprendizado de máquina e computação de alto desempenho (através do PPG-CCOMP) objetivando a participação mais ativa do grupo em sub detectores do CMS associados aos tópicos de física de interesse do grupo (física frontal, física de sabores pesados, supersimetria e bóson de Higgs). Tais atividades serão realizadas com países como EUA, Itália, Portugal, Espanha, Alemanha, por meio das instituições: LIP, CIEMAT, Univ de Aachen DESY, Univ Milano – Bicocca, e Politécnico de Bari.

Interações Fortes: Fundamentos Teóricos e Aplicações

Todos os processos na natureza são descritos através de quatro forças fundamentais. Uma delas, a interação forte, é o tema deste projeto de pesquisa e descreve a interação no interior do núcleo atômico, entre os constituintes fundamentais de toda a matéria conhecida. A cromodinâmica quântica é a teoria que descreve tal força em termos de partículas subatômicas chamadas quarks e glúons. Na fronteira da física encontram-se diversas perguntas relacionadas à interação forte: como era o universo frações de segundo após o big bang? O que acontece no interior de estrelas ultracompactas? E por que observamos dezenas de partículas compostas de quarks e glúons, como o próton e o nêutron, mas nunca detectamos esses blocos fundamentais diretamente?

O desenvolvimento teórico proposto neste projeto tem exatamente o objetivo de contribuir para responder tais perguntas e assim compreender a composição mais profunda da matéria conhecida.

Este projeto consiste em um conjunto de esforços teóricos para compreender como as interações fortes se manifestam em diferentes contextos em que a teoria fundamental, a cromodinâmica quântica, apresenta acoplamento forte e a aproximação perturbativa padrão não é aplicável. Um dos objetivos é a investigação do que acontece com essa interação a energias baixas, com o estudo de modelos teóricos para a descrição do confinamento de quarks e glúons no interior dos hádrons, como os prótons e os nêutrons. Propostas que visam um esquema de quantização apropriado para teorias de calibre não-abelianas nesse regime de baixas energias, com um tratamento apropriado da redundância de calibre, constituem parte essencial deste projeto. Tais teorias e suas aplicações são objetos centrais de investigação neste projeto.

Outra questão complementar que também é abordada trata-se do estudo de condições extremas, que poderiam gerar o desconfinamento dos quarks e glúons. TAIS PARCERIAS ENVOLVEM OS PAÍSES CHILE, URUGUAI, FRANÇA, VIETNÃ, BÉLGICA, ALEMANHA, ITÁLIA, por meio de convênios com as instituições: HEIDELBERG UNIVERSITAET, CEC-VALDIVIA, UNIVERSIDAD DE LA REPUBLICA, CEA-SACLAY, UNIVERSITÉ PARIS 7, ÉCOLE POLYTECHNIQUE, SORBONNE UNIVERSITÉ, DUY TAN UNIVERSITY, UNIVERSITY OF LEUVEN – KORTRIJK, HEIDELBERG UNIVERSITAET, GOETHE UNIVERSITAET FRANKFURT, HEIDELBERG UNIVERSITAET e INFN Torino.

Modelagem Computacional do Transporte Não-Clássico de Partículas Neutras

O transporte de partículas neutras tem muitas aplicações em física de reatores e transferência radiativa. Grupos de pesquisa no Brasil e em outros países vêm trabalhando na modelagem computacional determinística e estocástica do transporte de nêutrons e fótons, tanto de transporte clássico (sistemas com centros de espalhamento não correlacionados) como não-clássico (centros de espalhamento correlacionados). O grupo de pesquisa em Neutrônica Computacional Determinística (NCD) tem oferecido contribuições para simulações de transporte clássico desde 1997. O presente projeto será uma oportunidade para o NCD contribuir também na área do transporte não-clássico com o programa de pós-graduação proposto no NUCLEAR ENGINEERING GRADUATE PROGRAM / THE OHIO STATE UNIVERSITY, com publicações conjuntas e formação de estudantes de PG. Desde 1997, o grupo NCD vem trabalhando em simulações computacionais de transporte clássico de partículas neutras aplicadas à física de reatores e blindagem de radiação, destacando-se contribuições significativas para a solução numérica da equação linear de transporte de Boltzmann e da equação de difusão em grades espaciais grossas; notadamente a classe espectral de métodos numéricos de malha grossa. Estamos agora interessados em oferecer contribuições para simulações computacionais de transporte não clássico com aplicações amplas em geofísica e em reatores de muito alta temperatura (geração IV).

Propomos neste projeto iniciar colaborações com pesquisadores mais experientes no transporte não-clássico. Na teoria linear clássica do transporte de partículas neutras, a probabilidade de uma partícula em um determinado ponto do espaço e com energia cinética conhecida experimentar uma interação é independente da direção do movimento e do comprimento da trajetória, que é a distância percorrida pela partícula desde a sua interação anterior (nascimento ou espalhamento). Nesta situação, a equação linear clássica de Boltzmann é usada para modelar problemas de transporte de partículas em que as localizações dos centros de espalhamento não estão correlacionadas.

Neste projeto, propomos usar a equação generalizada não-clássica de Boltzmann como modelo para sistemas aleatórios estatisticamente homogêneos em que a função de distribuição para as distâncias entre os centros de espalhamento não é exponencial. Esta situação ocorre na descrição do transporte de fótons em nuvens atmosféricas e transporte de nêutrons em reatores nucleares de leito de esferas.

Modelagem Computacional em Experimentos de Tomografia Computadorizada e Fluorescência de Raios X

O estudo da aplicação de códigos Monte Carlo em experimentos de imageamento em Tomografia Computadorizada e na obtenção de composições elementares com a técnica de Fluorescência de Raios-X tem sido tema de vários trabalhos publicados recentemente e apresentados em conferências internacionais. Já vimos trabalhando neste tema com aplicações na área de Materiais e Arqueometria e esperamos ampliar essas aplicações com colaboradores que já temos parceria.

O PPG em Modelagem Computacional da UERJ já vem atuando na área aplicações do método de Monte Carlo em Tomografia Computadorizada como em Fluorescência de Raios X. Temos realizado e aprovado projetos conjuntos com o PPG em Física/UERJ na FINEP e comprados equipamentos para uso compartilhado. Temos a disposição um microtomógrafo Skyscan 1174, equipamentos de XRF (ARTAX200 e mais 5 espectrômetros AMPTEK com anodos variados, além de um DRX D2 da Bruker).

Temos participação conjunta em vários trabalhos e em co-orientações. O uso dos códigos Monte Carlo XRMC, GEANT4 e MCNP para comparar resultados de simulação e experimentais e sugerir modificações nesses programas para melhores resultados.

Através de colaboração estreita com a Universidade de Sassari, onde o código XRMC foi desenvolvido, esperamos enviar docentes e receber visitas técnicas de pessoal de lá, para estreitar essa colaboração.

Também esperamos estreitar as relações de colaboração com as Universidades de Roma (Sassari), Itália; St. Petersburgo, Rússia; Lisboa e Évora, em Portugal, para comparar resultados simulados e experimentais em amostras arqueológicas.

Modelagem Computacional para Aplicações em Engenharia e Meio Ambiente

A formulação e solução de problemas diretos e inversos constituem uma área de pesquisa com inúmeras aplicações relevantes em Engenharia, Biotecnologia e Meio Ambiente, apenas para citar algumas. O Brasil possui destaque no cenário internacional na área de problemas inversos, e um dos grupos de pesquisa mais fortes no país atua no Instituto Politécnico da UERJ, sob a coordenação do proponente do presente projeto de pesquisa de cooperação internacional. Diversas formulações e diferentes métodos de solução têm sido propostos por este grupo de pesquisa, há mais de 20 anos, em parceria com diferentes instituições do país e do exterior.

Este projeto permitirá consolidar as parcerias existentes, bem como ampliá-las, com resultados concretos tanto no que se refere à divulgação dos resultados das atividades de pesquisa, quanto na formação de recursos humanos no nível de pós-graduação. Estas atividades estão diretamente vinculadas às Linhas de Pesquisa do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional intituladas: (i) Matemática Aplicada e Computação Científica; e (ii) Termofluidodinâmica. Nos últimos dez anos (2007-2017) tiveram início e cresceram significativamente os projetos de cooperação internacional, no âmbito de Problemas Inversos com uso de Inteligência Computacional, levando à publicação de dois livros, seis capítulos, 24 artigos completos em periódicos, e 30 artigos completos em eventos científicos, além da formação de recursos humanos no Brasil e no exterior.

O projeto de pesquisa em cooperação internacional aqui proposto tem por objetivo central desenvolver a modelagem computacional, simulação e experimentação, com base em Problemas Inversos e Inteligência Computacional, visando aplicações em Engenharia, Biotecnologia e Meio Ambiente. Neste projeto serão desenvolvidas atividades teórico/analíticas, numéricas e experimentais em três eixos principais de atuação: (i) Transferência de Calor; (ii) Transporte/Transferência de Massa; e (iii) Identificação de Danos e Falhas em Sistemas Industriais. Este projeto fortalece uma parceria sólida construída com a Universidade Tecnológica de Havana José Antonio Echeverría no período de 2007 a 2017, bem como amplia sua abrangência com a participação da Universidade de Granada, da Espanha.

Tem-se, assim, um projeto de cooperação internacional trilateral: Brasil, Espanha e Cuba, a ser realizado no período de 2018 a 2022. Conexões também são estabelecidas com o BEIJING COMPUTATIONAL SCIENCE RESEARCH CENTER (CHINA).