

<b>Lead institution: MULTISCALE SOLUTIONS TECNOLOGIA E CONSULTORIA LTDA and Instituto de Física da Universidade de São Paulo</b>	
<b>Supervisor name: Aleksandro Kirch</b>	<b>Department: Departamento de Física de Materiais e Mecânica</b>
<b>Recipient: <a href="https://sites.usp.br/rcgi/opportunities/">https://sites.usp.br/rcgi/opportunities/</a></b> <b>Ref: 23TT250 – Technical Training Scholarship</b> <b>Deadline for submission: September 15<sup>th</sup>, 2023</b>	<b>Type: PIPE: TT-V</b> <b>Period: 40hs/week</b> <b>Number of months: 9</b> <b>Intended beginning date: October 1<sup>st</sup>, 2023</b>
<b>Project title: (Portuguese and English)</b> Métodos de Multiescala Aplicados à Otimização de Materiais e Sistemas <i>Multiscale Methods Applied to the Optimization of Materials and Systems</i>	
<b>Research theme area: (Portuguese and English)</b> <i>Ciência dos Materiais, Física, Química, Energia e áreas afins.</i> <i>Materials Science, Physics, Chemistry, Energy and related areas.</i>	
<b>Abstract (Portuguese and English)</b> <p>O projeto PIPE (<a href="https://fapesp.br/pipe/sobre/">https://fapesp.br/pipe/sobre/</a>) intitulado "Métodos de Multiescala Aplicados à Otimização de Materiais e Sistemas" tem como foco avaliar a aplicabilidade das simulações computacionais multiescala em problemas industriais. Usando uma abordagem metodológica que engloba a Teoria do Funcional da Densidade, simulações de Dinâmica Molecular e técnicas avançadas de Ciência de Dados, o projeto busca investigar a viabilidade da proposta.</p> <p>The PIPE project (<a href="https://fapesp.br/pipe/sobre/">https://fapesp.br/pipe/sobre/</a>) titled "Multiscale Methods Applied to the Optimization of Materials and Systems" aims to assess the applicability of multiscale computational simulations to industrial problems. Using a methodological approach that encloses Density Functional Theory, Molecular Dynamics simulations, and advanced Data Science techniques, the project seeks to investigate the feasibility of the proposal.</p>	
<b>Description (Portuguese and English)</b> Lista de Atividades: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Revisão da literatura.</li> <li>- Criação de canvas.</li> <li>- Elaboração de projetos.</li> <li>- Realização de simulações computacionais.</li> <li>- Escrita de relatórios.</li> <li>- Participação em reuniões e eventos</li> </ul>	
Adicionalmente, o bolsista irá colaborar com projetos ligados ao Research Centre For Gas Innovation e com	

o grupo Sampa de Simulação Computacional (IFUSP).

Activities List:

- 1 Literature review.
- 2 Canvas creation.
- 3 Project design.
- 4 Execution of computational simulations.
- 5 Report writing.
- 6 Participation in meetings and events

Additionally, the scholarship holder will collaborate with projects associated with the Research Centre For Gas Innovation and with the Sampa Computational Simulation group (IFUSP).

**Requirements to fill the position. (Ex: specific experience, minimum or maximum years after concluding the course) (Portuguese and English)**

Este projeto é adequado para um candidato que esteja altamente motivado e que possua experiência em cálculos de primeiros princípios (Teoria do Funcional da Densidade – DFT), redes de Boltzmann e simulações de Dinâmica Molecular. Ter experiência com ciência de dados e aprendizado de máquina será considerado um diferencial. Para a posição oferecida (TT-5 <https://fapesp.br/3098/niveis-de-bolsas-tt>), o candidato deve já ser graduado (em Física, Química, Engenharia, Matemática ou áreas afins), com no mínimo cinco anos de experiência em pesquisa ou experiência profissional após a graduação, ou possuir título de doutor, ambos em área relacionada ao Plano de Atividades proposto. Além disso, é requerida dedicação de 40 horas semanais presenciais na cidade de São Paulo-SP. O início do projeto é no dia 1º de outubro e as inscrições vão até o dia 15 de setembro.

This project is suitable for a highly motivated candidate with experience in first-principles calculations (Density Functional Theory – DFT), Boltzmann networks, and Molecular Dynamics simulations. Experience with data science and machine learning is a plus. For the offered position (TT-5 <https://fapesp.br/3098/niveis-de-bolsas-tt>), the candidate must already hold a degree (in Physics, Chemistry, Engineering, Mathematics, or related fields), with at least five years of research experience or professional experience post-graduation, or possess a doctoral degree, both in areas related to the proposed Activity Plan. Additionally, a commitment of 40 on-site hours per week in São Paulo-SP is required. The project start date is October 1st, and applications will be accepted until September 15th.

**Funding Notes:** This fellowship is funded by FAPESP. The fellowship or scholarship will cover a standard maintenance stipend of R\$ 9,046.00 per month.

**Documents/Information to be Sent:**

**Ref: 23TT250**

Fill-in the application form: <https://forms.gle/cWGGHjFLupxmCTCk9> with the following information:

- Updated CV including all your publications (with a link to the Lattes Curriculum, if applicable);
- Number of publications, number of citation and H index (base Scopus and Google Scholar) - for Postdoctoral positions;
- Date of PhD conclusion - for Postdoctoral positions;
- A copy of the academic record/academic transcript of both graduate and undergraduate courses;
- A motivation letter highlighting your background and research interests (in English) **to be filled in the application form.**

Deadline: September 15<sup>th</sup>, 2023

In case you have any question, please write to [alexandrokirch@gmail.com](mailto:alexandrokirch@gmail.com)