



**Disciplina: IQ707 - Simulação Molecular para
Cálculo Propriedades Fluidos Derivados
Petróleo**

Responsável: Luís Fernando Mercier Franco (lmfranco@unicamp.br)

Período: 1 semestre de 2022

Estrutura: Aulas teóricas combinadas com discussões em grupo

Avaliação: Trabalhos individuais

Programa:

i) Dinâmica Molecular:

Configuração inicial;

Distribuição de Maxwell-Boltzmann;

Algoritmos de integração: Verlet de velocidade;

Convenção da Imagem Mínima e Condição Periódica de Contorno;

Cálculo de temperatura e pressão.

ii) Monte Carlo:

Configuração inicial;

Cadeias de Markov;

Algoritmo de Metropolis;

Cálculo da pressão e do potencial químico.

iii) Cálculo de propriedades termofísicas:

Cálculo de propriedades derivadas por teoria de flutuação;

Cálculo da função de distribuição radial;

Cálculo de coeficiente de difusão (Einstein) e de viscosidade (Green-Kubo).

Referências:

Allen, M. P.; Tildesley, D. J., Computer Simulation of Liquids, 2ed, Oxford University Press, 2017

Frenkel, D.; Smit, B., Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Academic Press, 2002