



**Universidade:  
presente!**

**UFRGS**  
PROPEAQ



**XXXI SIC**

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Método de Simulação Mesoscópica em Dinâmica Molecular para Flúidos Carregados
<b>Autor</b>	IGOR MORAIS TELLES
<b>Orientador</b>	ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

Instituto de Física - UFRGS  
Método de Simulação Mesoscópica em Dinâmica Molecular para Fluídos Carregados

Autor: Igor Morais Telles  
Orientador: Alexandre Pereira dos Santos

Simulações computacionais apresentam um papel importante devido a facilidade em lidar com sistemas de muitas partículas. Um dos tipos de simulação computacional, é o método de dinâmica molecular, onde todas as partículas envolvidas na simulação interagem entre si através de potenciais conhecidos. A escala da simulação é fundamental para os resultados que se deseja obter. Por exemplo, para investigar fenômenos microscópicos implementam-se simulações nessa escala, mas simulações em escala microscópica elevam o custo computacional. É nesse caso que simulações mesoscópicas são úteis, pois através delas ainda se pode medir fenômenos microscópicos sem um grande custo computacional.

Este projeto tem por objetivo apresentar um método em escala mesoscópica de dinâmica molecular e estudar o fenômeno da eletroosmose em fluídos carregados. O método usa a técnica de simulação *Dissipative Particle Dynamics* (DPD) que se baseia na simulação de esferas suaves governadas por certas regras de colisão. As interações entre partículas carregadas, íons, são governadas por potenciais coulombianos. O fluído é confinado em uma direção por paredes que apresentam uma condição de não deslizamento, enquanto nas demais direções há condições periódicas de contorno. Para validar o método, comparam-se os resultados obtidos com as previsões teóricas das equações de Navier-Stokes. Para o estudo da eletroosmose aplica-se um campo elétrico perpendicular às paredes, sendo essas paredes placas carregadas positivamente. Devido ao campo elétrico os íons presentes dentro do solvente são induzidos a entrar em um movimento paralelo às placas. Os íons interagem com as partículas do solvente e faz com que tenham este mesmo movimento. Os resultados obtidos foram compatíveis com as previsões da equação de Stokes.