

## **Interacciones moleculares en hidrocarburos. Viscosidad y relaciones con fluidos**

Fernando Ruelle, Laboratorio Química Computacional, Centro de Química, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), Caracas, Venezuela)

El estudio de fluidos es muy relevante para mejorar y optimizar la producción en la industria petrolera y petroquímica, por lo tanto mucha investigación se requiere para alcanzar logros significativos en esta área. La viscosidad es una de las propiedades más importantes de los hidrocarburos en los aspectos operacionales de producción, transporte, refinación y petroquímica. En este sentido, la viscosidad se encuentra directamente relacionada con la dinámica de fluidos a través de la ecuación de Navier-Stokes. Por otro lado, la viscosidad es una de las propiedades vinculadas con la estructura y las interacciones moleculares para el análisis de fluidos. Por lo tanto, es valioso encontrar correlaciones entre viscosidad y flujo de fluidos.

Este seminario es una propuesta de correlaciones entre diferentes niveles de simulación considerando las leyes de la física para ir desde lo micro (nivel molecular) a lo macro (materiales y condiciones experimentales). Las propiedades de tensión interfacial, equilibrios de fase y energía de interacciones moleculares pueden ser tomadas en cuenta para establecer correlaciones en simulaciones de fluidos.

El seminario está estructurado de siguiente manera, en primer lugar se presenta la importancia de fluidos en la industria petrolera y petroquímica considerando la viscosidad. En el estudio de modelado se ilustran ejemplos de multiescala para ir de lo micro a lo macro. Una pequeña reseña de la teoría de los diferentes métodos a diferentes escalas es esquematizada. Ejemplos de catálisis y fluidos de la literatura son mostrados donde los resultados a nivel micro pueden emplearse en el análisis de la escala macro. Propiedades asociadas a fluidos son evaluadas considerando ejemplos de correlaciones entre métodos cuánticos con propiedades macroscópicas. Finalmente se plantea el uso de interfaces multidisciplinarias como mecanismo de poder lograr la intercorrelación micro-meso-macro de manera pragmática.