Análisis de nanopartículas usadas en lodos de perforación base Agua-Bentonita mediante simulación de dinámica molecular y su impacto en el filtrado del lodo

Maicol Stiben Vinchira López

Anyi Daniela Angarita Valbuena

Proyecto de grado para obtener el título de

Ingenieros de petróleos

Director:

MSc. Diego Armando Vargas Silva

Codirector:

Qco. Andrés Camilo López Meza

MSc. Francisco Alejandro Ospino

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Físico Químicas

Departamento de Ingeniería de Petróleos

Bucaramanga Santander

2021

Agradecimientos

Primeramente, a Dios por permitirme recorrer este camino, por ponerme frente a esta carrera universitaria. Por darme el momento y tiempo perfecto destinados para ella y por mostrarme día a día lo cerca que estaba de cumplir mis sueños; luego están mis padres que han sido un pilar muy importante en mi crecimiento tanto como persona como profesional, les agradezco infinitamente cada uno de los sacrificios que hicieron durante mi vida universitaria y durante toda mi vida para que cumpliera el primero de muchos sueños, mis hermanas Carol y Yeyis que estuvieron ahí siempre apoyándome, empujándome y dándome ánimos para lograrlo.

Agradezco a cada una de las personas que me acompañaron durante una de las etapas más importantes como lo es la vida universitaria a mis amigos de estudio "el equipo" con sus desveladas, pero especialmente le agradezco a mi compañero, amigo y hermano Maicol Vinchira por cada uno de los momentos vividos, por cada una de las aventuras y por cada uno de los consejos que a medianoche me daba. También a "Tati" por ser esa persona especial, sencilla y humilde con la que compartí tiempo y pude disfrutar la mayor parte de este proceso de crecimiento.

A el ingeniero Francisco Acevedo, como nuestra mano derecha en este último ciclo de la carrera, por ser el guía y la persona que nos enseñó demasiado durante esta investigación, infinitas gracias, gracias por cada clase por cada consulta y por toda la colaboración brindada hacia esta nuestra investigación, a las demás personas por apoyarnos y contactarnos con cada una de las personas que dieron su aporte en esta investigación. A las personas que hicieron posible esta investigación gracias por ponernos un reto de esta magnitud y demostrarnos a nosotros mismos que pase lo que pase siempre lo vamos a lograr.

Daniela.

Primero agradecer a Dios por una promesa más cumplida. Por acompañarme en los momentos buenos y malos, por ser mí soporte, por darme inteligencia, sabiduría y entendimiento para culminar mi carrera de la mejor manera. A mis padres Víctor y Dalia por ser los mejores, porque con su ejemplo me han enseñado a ser una gran persona y profesional, a nunca rendirme, a luchar por mis sueños, y como no agradecerles por su apoyo infinito, por motivarme y por sacarme siempre adelante, esto es mas de ustedes que mío. A mis hermanos Julio y Jessika por ser mi ejemplo, mis alcahuetas, por sus palabras de aliento, por sus regaños y sobre todo por siempre estar ahí cuando los necesito. A mi Hijo Emmanuel, por ser el motor de mi vida, mi motivación, el motivo de querer salir adelante y cumplir todos mis sueños, por ser mi inspiración en momentos que veía todo al revés, pero más que eso porque quiero que se sienta orgulloso de mi.

A mi viejo Jorge por todo, por ser luz en la vida de todos nosotros, por estar siempre, por apoyarme, por aconsejarme, por ser tan alcahueta, simplemente gracias mi viejo hermoso. A mi tía Sonia por sus palabras de aliento, por aconsejarme, por escucharme, por motivarme y sobre todo por creer en mí. A mi compañera de tesis Dani que más que eso es mi amiga, mi compinche, gracias por todas las trasnochadas, por las risas, por las tristezas, por los miles de veces que intentamos sacar este proyecto adelante, por compartir todos estos años de carrera, espero verte cumpliendo tus sueños, éxitos. A mi mejor amigo, mi hermano, Diego porque desde pequeños siempre hemos estado ahí apoyándonos, riendo, llorando, pero sobre todo disfrutando de los buenos y malos momentos.

Gracias a Camilo López y a Julián por todo el apoyo brindado a esta investigación, por siempre estar dispuestos a ayudarnos y dar lo mejor de sí para que esto saliera adelante.

Maicol.

Tabla de contenido

	Pág.
Introducción	12
1. Objetivos	13
1.1 Objetivo general	13
1.2 Objetivos específicos	13
2. Marco Teórico	14
2.1 Clasificación de los principales fluidos de perforación	15
2.1.1 Lodos base agua bentonita	15
2.2 Pérdidas de fluido	16
2.3 Dinámica molecular	17
2.4 Algoritmos de gradiente conjugado	18
2.4.1 Algoritmo de gradiente conjugado no lineal	19
2.4.2 Algoritmo general de gradiente conjugado	20
2.4.3 Cálculo de la viscosidad mediante el método de perturbación periódica	21
3. Tipos y selección de software	22
3.1 Softwares para dinámica molecular	22
3.2 LAMMPS	27
3.2.1 Campo de fuerza CLAYFF	30
3.2.2 Potenciales de interacción	32
3.2.3 Control de las propiedades termodinámicas del sistema	34
4. Criterios de selección de nanopartículas para el mejoramiento del filtrado	36
4.1 Nanopartículas	36
4.1.1 Clasificación de las nanopartículas	36
4.1.2 Nanopartículas aplicadas en los fluidos de perforación	38

NANOPARTÍCULAS USADAS EN LODOS DE PERFORACIÓN.

47
48
53
55
56
57
58
59
59
60
61
62
64
64
64
69
71
77
83
84
85
92

Lista de tablas

Tabla 1. Simuladores de dinámica molecular	22
Tabla 2. Parámetros no adherentes para el campo de fuerza CLAYFF	32
Tabla 3. Clasificación de las nanopartículas	37
Tabla 4. Nanopartículas en lodos de perforación	43
Tabla 5. Parámetros adheridos para la nanosílice.	61
Tabla 6. Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 300K.	68
Tabla 7. Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 500K.	68
Tabla 8. Resultados de Viscosidad y Densidad experimentales y simulados a 300K y 500K	69
Tabla 9. Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 300K.	75
Tabla 10. Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 500K.	76
Tabla 11. Resultados de Viscosidad y Densidad experimentales y simulados a 300K y 500K	77

Lista de figuras

Figura 1. Ciclo del fluido de perforación	14
Figura 2. Clasificación de los tipos de fluidos de perforación	15
Figura 3. Perdidas por presencia de problemas durante la Perforación	16
Figura 4. Modelamiento Multiescalar de Materiales	18
Figura 5. Algoritmo de código abierto	27
Figura 6. Iteraciones en el campo de fuerza	31
Figura 7. Nanotecnología en procesos de perforación	39
Figura 8.Estado del dióxido de Silicio	49
Figura 9.Imagen de Laboratorio	49
Figura 10. Solución acuosa con Nanosílice	52
Figura 11. Efecto de taponamiento de fracturas con diferentes concentraciones de Nanosílice	53
Figura 12. Metodología de Simulación	55
Figura 13. Estructura Cristalográfica Montmorillonita	56
Figura 14. Estructura Cristalográfica Sílice	58
Figura 15. Tipos de átomos en el modelo de la sílice	58
Figura 16. Modelo del lodo base	60
Figura 17. Modelo de lodo base con adición de nanopartícula	62
Figura 18. Modelo de lodo base con extracción de la nanosílice	63
Figura 19. Resultados de la Energía vs Tiempo a 300K	65
Figura 20. Resultados del Volumen vs Tiempo a 300K	65
Figura 21. Resultados Densidad vs Tiempo a 300K.	66
Figura 22. Resultados del Energía vs Tiempo a 500K	66

Figura 23. Resultados del Volumen vs Tiempo a 500K	67
Figura 24. Resultados del Densidad vs Tiempo a 500K	67
Figura 25. Resultados de Energía vs Tiempo	70
Figura 26.Resultados de Volumen vs Tiempo	70
Figura 27. Resultados de Densidad vs Tiempo	71
Figura 28. Resultados de la Volumen vs Tiempo a 300K	72
Figura 29. Resultados de la Densidad vs Tiempo a 300K	73
Figura 30. Resultados de la Energía vs Tiempo a 300K	73
Figura 31. Resultados de la Volumen vs Tiempo a 500K	74
Figura 32. Resultados de la Densidad vs Tiempo a 500K	74
Figura 33. Resultados de la Energía vs Tiempo a 500K	75
Figura 34. Comparación de densidad a 300K.	78
Figura 35. Comparación de Viscosidad a 300K.	78
Figura 36. Comparación de densidad a 500K.	79
Figura 37. Comparación de Viscosidad a 500K.	79
Figura 38. Relación entre la pérdida de filtrado y la raíz cuadrada del tiempo	81
Figura 39. Repulsión entre Partículas de Bentonita y Nanosílice	82

Lista de Apéndices

Pág.

9

Apéndice A. Topología de los modelos de lodo base	92
Apéndice B. Topología de la nanosílice	101
Apéndice C. Topología de lodo base con nanosílice	104
Apéndice D. Validación del lodo base	111
Apéndice E. Cálculo de la viscosidad	116
Apéndice F. Validación nanopartícula de sílice	126
Apéndice G. Validación del lodo base con adición de nanosílice	130

Resumen

Título: Análisis de nanopartículas usadas en lodos de perforación base agua-bentonita mediante simulación de dinámica molecular y su impacto en el filtrado del lodo^{*}

Autores: Anyi Daniela Angarita Valbuena – Maicol Stiben Vinchira López**

Palabras claves: Dinámica Molecular, nanopartículas, simulación, Fluido de perforación,

Retorta, Filtrado, Sílice.

Descripción:

En el presente trabajo de grado se presentará, un estudio investigativo que como propósito tiene estudiar el uso de las nanopartículas para el mejoramiento de lodos de perforación debido a que, en los procesos de perforación, los daños a la formación, las pérdidas de circulación e hinchamiento de arcillas son problemas recurrentes, es por eso, por lo que es necesario seleccionar el lodo adecuado que cumpla con los requerimientos óptimos y que permitan reducir las pérdidas de filtrado.

Primeramente, se propuso la adición de nanopartículas de sio2 escogidas por medio del análisis a papers, con el fin de mitigar ciertos problemas causados en la etapa de perforación, donde se realizaron pruebas experimentales con diferentes tipos de nanopartículas, siendo el sio2 la más eficiente en los problemas de reducción de filtrado y espesor de la retorta específicamente, como también se pudo observar que las nanopartículas de sílice no generan efectos adversos en las propiedades del lodo.

Seguido a ello; por medio de software se realizaron las estructuras de la nanopartícula de sílice y del lodo base agua bentonita para iniciar una simulación de dinámica molecular y así observar el comportamiento y la interacción entre los átomos que proporcionaran información necesaria para correlacionar con los datos experimentales.

^{*} Trabajo de grado.

^{**} Facultad de Ingenierías Fisicoquímica. Escuela de Ingeniería de petróleos. Director: Diego Vargas Silva. Codirector Andrés Camilo López Meza, Francisco Alejandro Ospino

Abstract

Title: Analysis of nanoparticles used in water-bentonite based drilling muds through molecular dynamics simulation and their impact on mud filtration^{*}

Authors: Anyi Daniela Angarita Valbuena - Maicol Stiben Vinchira Lopez**

Keywords: Molecular Dynamics, nanoparticles, simulation, Drilling Fluid, Retorta, Filtration, Silica.

Description:

This degree work is a research study that aims to study the use of nanoparticles for the improvement of drilling muds due to the fact that, in drilling processes, formation damage, circulation losses and clay swelling are recurrent problems, that is why it is necessary to select the appropriate mud that meets the optimal requirements and that allow reducing filtrate losses.

Firstly, in order to mitigate certain problems caused in the drilling stage, the addition of sio2 nanoparticles chosen through the analysis of papers where experimental tests were carried out with different types of nanoparticles, being sio2 the most efficient in the problems of filtrate reduction and retort thickness specifically, as it was also observed that silica nanoparticles do not generate adverse effects on the mud properties.

After this, by means of software, the structures of the silica nanoparticle and the bentonite waterbased sludge were created to initiate a molecular dynamics simulation and thus observe the behavior and interaction between the atoms that would provide the necessary information to correlate with the experimental data.

^{*} Bachelor thesis

^{**} Facultad de Ingenierías Fisicoquímica. Escuela de Ingeniería de petróleos. Director: Diego Vargas Silva. Codirector Andrés Camilo López Meza, Francisco Alejandro Ospino

Introducción

En la actualidad la industria petrolera está incursionando en nuevas tecnologías tales como la nanotecnología, con el objetivo de desarrollar enormes oportunidades en el desarrollo de fluidos de perforación para producir petróleo, que permite excelentes resultados en la perforación, producción y recobro mejorado. En 1959 el premio nobel y físico norteamericano Richard Feynman dio a conocer los primeros avances en la nanotecnología que abren la posibilidad de ir más allá de las actuales alternativas para el suministro de energía mediante la introducción de tecnologías más eficientes y ecológicamente racionales.

En las operaciones de perforación de un pozo petrolero es necesario seleccionar el lodo adecuado que cumpla con los requerimientos óptimos que permitan reducir las pérdidas de filtrado en lodos base agua, además cabe resaltar que uno de los problemas más recurrentes en el proceso de perforación son los daños a la formación, perdida de circulación e hinchamiento de arcillas, es por lo que Y. Jung et al. Ha sugerido de los beneficios potenciales de la adición de nanopartículas (comerciales) al lodo base agua al mejorar las propiedades reológicas (viscosidad dinámica) del fluido a condiciones de yacimiento.

Por lo que la presente investigación tiene como propósito el estudio de la interacción de las moléculas de nanopartículas en los fluidos especialmente los lodos base agua mediante la dinámica molecular para poder brindar una solución factible a los daños ocasionados en la operación y así poder reducir el efecto del filtrado en las formaciones de interés mediante el modelamiento de un sistema computacional de fluidos que proporciona como ventaja la complementación de las aproximaciones analíticas con las experimentales.

1. Objetivos

1.1 Objetivo general

Estudiar el comportamiento de nanopartículas usadas en lodos de perforación base agua bentonita mediante simulación de dinámica molecular para prevenir los efectos del filtrado de lodo.

1.2 Objetivos específicos

Definir un software mediante el análisis conceptual que cumpla con los requerimientos necesarios para la simulación de dinámica molecular.

Elaborar un flujo de trabajo para el análisis conceptual de la reducción del filtrado del lodo mediante el estudio de nanopartículas en lodos de perforación base agua bentonita basados en estudios previamente consultados en la literatura.

Definir la nanopartícula con mayor eficiencia para la reducción del filtrado del lodo según los análisis realizados mediante la investigación.

Comparar los resultados de la eficiencia de las nanopartículas por medio de la simulación de dinámica molecular y resultados experimentales en papers científicos.

2. Marco Teórico

Para la perforación de pozos de petróleo y gas desde el principio ha sido necesario el uso de fluidos de perforación como un procedimiento preventivo para estabilizar las paredes del hueco, garantizar la lubricación de la broca y aportar hidrostática con el fin de obtener una operación eficiente.

Los fluidos de perforación manejan un proceso cíclico constante como se observa en la figura 1; es por eso que es de vital relevancia mantener la calidad del fluido dentro de los niveles deseables y preestablecidos, para eludir problemas de inestabilidad del pozo, así mismo es importante recordar que las propiedades de un fluido no son valores fijos y pueden ser ajustados y es responsabilidad del profesional tomar las muestras del lodo a la entrada y salida del pozo para la comparación de los valores y efectuar los ajustes en caso de ser necesario.

Figura 1.





Nota: Adaptado de PDVSA CIED. Manual de fluidos de perforación. 2009. P13

2.1 Clasificación de los principales fluidos de perforación

Existen diferentes tipos de fluidos de perforación según su composición pueden ser base agua, base aceite o aireados como lo observamos en la figura 2.

Figura 2.

Clasificación de los tipos de fluidos de perforación



Nota: Adaptado de Halliburton Latín American S.A. Baroid Manual de Fluidos de perforación. 2012. p. 67

2.1.1 Lodos base agua bentonita

Estos lodos funcionan para el control de filtración y viscosidad, debido a que la bentonita es un mineral de arcilla que se compone principalmente de arcilla de tres capas y que es utilizada como adictivo en estos lodos. Desafortunadamente, los adictivos pueden perder su eficacia en operaciones reales de perforación, debido a los iones de dureza en el agua, altas temperaturas, ataque bacteriano, la degradación por cizalladura mecánica y otros factores que pueden hacer que estos aditivos resulten ineficaces.

2.2 Pérdidas de fluido

Existen fracturas de manera natural o inducida, pero también existen grietas o canales que ocasionan pérdidas de fluido de manera parcial o completa (Figura 3) durante los inicios del proceso de perforación. El tipo de formación es clave en el estudio de perdidas ya que existen formaciones no consolidadas que pueden generar pérdidas por fracturas naturales.

Aunque el estudio de pérdidas de filtrado de lodo ha tomado fuerza desde la década de los 90, controlar este fenómeno es muy difícil y aun no se tiene control, ya que depende no solo de las propiedades de los fluidos de perforación si no de las características petrofísicas y geomecánicas de los estratos, consecuencia que afecta los tiempos no productivos por sus siglas en inglés (NPT) y costos en la operación.

Figura 3.

Perdidas por presencia de problemas durante la Perforación



Nota: Adaptado de Nanoparticles: Promising Solution to Overcome Stern Drilling Problems, Dr. JamilAbdo, M. Danish Haneef, collage of Engineering Mechanical

2.3 Dinámica molecular

Una metodología para estudiar sistemas complejos es la llamada modelización multiescalar figura (4), es por eso por lo que en los últimos 20 años las simulaciones se han convertido en una parte esencial para observar y analizar el comportamiento de las moléculas a escala nano con una excelente resolución tanto espacial como temporal, además de comprender los diferentes estudios entre la teoría y experimentación. Con la ayuda de la nanotecnología se construyen interacciones de átomos y moléculas para lograr una visualización virtual del movimiento de estas partículas, debido a que su tamaño es imperceptible para el ojo humano (AR Valdez Alvarado 2010).

Hoy en día existen muchos métodos de simulación, teniendo como referente la que aborda la dinámica molecular que consiste en una descripción de la interacción del movimiento de partículas, para poder predecir el comportamiento de esas partículas con el tiempo. La dinámica molecular es una técnica computacional de simulación utilizada actualmente para calcular propiedades de transporte y equilibrio de sistemas de muchos cuerpos, en donde se estudia el movimiento de partículas individuales en modelos de sólidos, líquidos y gases con una excelente aproximación. Estas simulaciones están regidas por las leyes de la mecánica clásica, donde se calcula el cambio de posición, velocidad y orientación de las partículas en función del tiempo.

Hasta la fecha se siguen teniendo algunas dificultades para resolver analíticamente las ecuaciones de movimiento de un sistema de muchas partículas, resaltando que se ha estado avanzando poco a poco, lo que ha facilitado el estudio a nivel atómico de la estructura y dinámica tanto de materiales como el grafeno, como estructuras complejas de tipo biomolecular y compuestos químicos.

Figura 4.

Modelamiento Multiescalar de Materiales



Nota: Adaptado de The quasicontinuum method: theory and applications. Multiscale Materials Modeling for Nanomechanics, Springer, New York. 2016. p 160.

2.4 Algoritmos de gradiente conjugado

La energía potencial (campo de fuerza), está relacionada con la estructura, más específicamente con la geometría de la molécula, proporcionando números mínimos de energía. Según estudios realizados por Navon et al. [1992a, 1992b], Wang, et al. [1995] y Zou et al. [1993], dan a conocer que "Newton truncado", (TN, [Nash, 1984]) y BFGS limitado (L-BFGS, [Liu y Nocedal, 1989]), son métodos más eficientes que otras técnicas para optimización. El método clásico de Newton con disposición de almacenamiento y fácil acceso computacional relaciona la tasa de convergencia cuadrática para el método de Newton truncado. El algoritmo L-BFGS es mucho más sencillo debido a que no necesita conocer la estructura de dispersión del hessiano ni tampoco de la separabilidad de la función de minimización. Teniendo en cuenta lo anterior el algoritmo L-BFGS tiene un mejor comportamiento al algoritmo TN para funciones

complejas no lineales, por el contrario, el algoritmo TN trabaja mejor que el algoritmo L-BFGS para funciones cuadráticas.

2.4.1 Algoritmo de gradiente conjugado no lineal

Existen conocidas versiones de métodos de gradiente no lineal con sus propiedades de convergencia; Hager y Zhang [2005] basaron sus estudios en estos métodos de gradiente no lineal, pero centrando su estudio en las propiedades de convergencia global, considerando el problema de minimización de n variables:

Algoritmo de gradiente conjugado

$$\min f(x)$$
 (1)

Donde $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es una función diferenciable continua con $g(x) = \nabla f(x)$ su gradiente. Los algoritmos de gradiente conjugado que resuelve la ecuación (1) son métodos iterativos de la forma:

$$X_{k+1} = X_k + \alpha_k d_k \quad (2)$$

Donde $\alpha_k > 0$ es una longitud de paso y d_k es una dirección de búsqueda. La dirección de búsqueda en la primera iteración es la dirección de descenso más empinada: $d_0 = -g_0 \equiv \nabla f(x_0)$. Las direcciones a lo largo de las iteraciones se calculan de acuerdo con:

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k \qquad (3)$$

Donde β_k es un escalar. El algoritmo de gradiente conjugado no lineal para el problema general de optimización si restricciones fue propuesto por primera vez por Fletcher y Reeves [1964]. En este caso es reemplazado por $d_{k+1}^T y_k = 0$, donde $y_k = g_{k+1} - g_k$. Esto esta generado por las siguientes relaciones:

$$d_{k+1}^T A d_k = \frac{1}{\alpha_k} d_{k+1}^T A (x_{k+1} - x_k) = \frac{1}{\alpha_k} d_{k+1}^T (g_{k+1} - g_k) = \frac{1}{\alpha_k} d_{k+1}^T y_k$$

O por el teorema del valor medio.

$$d_{k+1}^T y_k = \alpha_k d_{k+1}^T \nabla^2 f(x_k + \theta \alpha_k d_k) d_k$$

Para algunos $\theta \in (0,1)$.

Para asegurar la convergencia del algoritmo (2) es necesario restringir la elección de α_k . Por lo general la longitud del paso se selecciona para satisfacer las condiciones de búsqueda de las líneas de Wolfe (1969.1971):

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \le \sigma_1 \alpha_1 g_k^T d_k \qquad (4)$$
$$\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \ge \sigma_2 g_k^T d_k \qquad (5)$$

Donde $0 < \sigma_1 \le \sigma_2 < 1$. Para algunos algoritmos de gradiente conjugado, se necesitan versiones más fuertes de las condiciones de búsqueda de la línea de Wolfe para asegurar la convergencia y la estabilidad. Las fuertes condiciones de Wolfe se ven reflejada en la ecuación (4) y las siguientes condiciones fortalecidas en la ecuación (5).

$$|\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \le \sigma_2 g_k^T d_k \qquad (6)$$

2.4.2 Algoritmo general de gradiente conjugado

Paso 1: Seleccione x_0 , colocar $d_0 = -g_0$ y k = 0.

Paso 2: Calcule la longitud del paso $\alpha_0 > 0$ satisfactorio para la búsqueda de línea de Wolfe 4 y 5.

Paso 3: Calcular $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$. Si $||g_{k+1}|| \le \varepsilon$, luego se detiene.

Paso 4: Calcule β_k y genere la dirección $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$.

Paso 5: Establecer k = k + 1 y vaya al paso 2.

2.4.3 Cálculo de la viscosidad mediante el método de perturbación periódica

Mediante el método de perturbación periódica que consiste en aplicar una fuerza externa que es función de la coordenada en dirección z a la dirección x para cada una de las partículas, creándose así una velocidad del fluido; el campo de velocidad cumple con la ecuación de Navier-Stokes:

$$\rho \frac{\partial_u}{\partial_t} + \rho(u, \nabla)u = \rho a - \nabla p + \eta \nabla^2 u \quad (7)$$

Con la derivada de la ecuación (7) y algunas correlaciones e integraciones se obtiene la ecuación para el cálculo de viscosidad durante el tiempo de simulación:

$$v_{(t)} = 2\sum_{i=1}^{N} m_i v_{i,x}(t) \cos\left(kr_{i,z}(t)\right) / \sum_{i=1}^{N} m_i \quad (8)$$

De la ecuación anterior se observa que la viscosidad calculada está sujeta a la amplitud de la aceleración en un compuesto; esta amplitud debería ser significativamente pequeña de manera que su perturbación no afecte el equilibrio del sistema.

Con la siguiente ecuación (9), se calculan valores mediante el método de promedio de bloqueo para eliminar la incertidumbre y así poder dar un valor dentro de los rangos.

$$\sigma(m) \approx \sqrt{\frac{c_0(\frac{n}{m})}{\frac{n}{m}-1}} \left(1 \mp \frac{1}{\sqrt{2(\frac{n}{m}-1)}}\right) \quad (9)$$

Donde n es el número total de datos y $c_0\left(\frac{n}{m}\right)$ está definido como:

$$c_0(t) = \frac{1}{t} \sum_{k=1}^t (x_k - \bar{x})^2$$

3. Tipos y selección de software

3.1 Softwares para dinámica molecular

Existen diferentes simuladores para el análisis de dinámica molecular anexo, en la tabla 1:

Tabla 1.

Simuladores de dinámica molecular

Simulador	nulador Características S		Ventajas	Desventajas	Aplicaciones
	Generales	Operativo			
	Distribución de código	Linux	Es uno de los pocos	No está diseñado	Mecánica
	abierto.	Windows	programas de dinámica	para construir	molecular.
	Fácil de ampliar con	Mac	molecular que dispone	sistemas moleculares	Computación
	nuevas características		de un potencial reactivo	o construir tipologías	paralela
	Se ejecuta desde un		ya implementado.	moleculares.	Simulación
	script de entrada.		Trabaja eficientemente	Asignar coeficientes	molecular.
	Sintaxis para definir y		en una computadora de	de campos de fuerza	
	usar variables y		escritorio o portátil de	aleatoriamente.	
	formulas.		procesador simple	Realizar un análisis	
	Ejecuta una o varias		Puede modelar conjunto	sofisticado de su	
	simulaciones		de partículas en estado	simulación MD	
	simultáneamente desde		sólido, líquido o		
	un script.		gaseoso.		
LAMMPS			Puede utilizarse para		
			modelar átomos o como		
			un simulador de		
			partículas paralelas en la		
			escala atómica,		

			mesoscópica o continua.		
	Simulador con código abierto. Las propiedades físicas macroscópicas se	Linux Windows Mac	Funciona muy bien para moléculas con estructuras representativas.	El conocimiento de una sola estructura, incluso si es la estructura del	Simulación de dinámica. Química computacional.
	pueden distinguir por		Conserva la energía	mínimo energético	Simulación
MAC	propiedades		para potenciales tipo	global, no es	dinámica en
	de equilibrio estático.		Lennard-Jones	suficiente.	paralelo.
	Describe las			Para calcular	Minimización de
	propiedades de			propiedades	energía
	sistemas moleculares			macroscópicas es	
	con alta precisión.			necesario generar un	
	El modelado molecular			conjunto	
	se basa completamente			representativo en un	
	en una similitud al			determinado de	
	análisis de datos			temperatura.	
	estructurales y			No funciona bien	
	químicos conocidos.			cuando la molécula	
				no es puntual.	
				El cálculo de	
				energías libres y	
				potenciales	
				termodinamicos	
				requieren extensiones	
				especiales de técnicas	
				de simulación	
	A 1 1/ 1 1/	T ·	TT 1 2 1	molecular.	C' 1 ' 1
	Admite algoritmos que	Linux	Un novedoso metodo	no se puede construir	Simulaciones de

GRO S

	se utilizan normalmente para realizar moléculas rápidas precisas. La energía y las fuerzas		paralelo de descomposición que reduce en gran medida el requisito para la	el sistema de moléculas requiere de otros programas Requiere de campos	sistemas biológicos. Simulación de sistemas químicos
DESMOND	electrostaticas de largo alcance se calculan utilizando técnicas de Ewald basada en mallas de partículas. Incluye herramientas para un análisis de energía y equilibrio robusto. Métodos para restringir posiciones atómicas, así como configuraciones moleculares Se puede utilizar para realizar cálculos de energía libre absoluta y		confuncación entre procesadores. Emplea nuevas técnicas numéricas que le permiten utilizar cálculos de precisión simple manteniendo una alta precisión. Modelara con precisión relaciones termodinámicas que dependen de un equilibrio detallado y también dan como resultado una energía muy baja.	de Iuerza como AMBER Y CHARMM No permite la visualización de su simulación de manera interactiva	
CHARMM	relativa.Sedirigeprincipalmenteasistemas biológicos queincluyenpéptidos,proteínas,gruposprotésicosgruposContieneuncompletode	Unix – Linux	Una gran cantidad de herramientas para el análisis estadístico y termodinámico de las trayectorias moleculares Cuenta con un sinfín de campos de fuerza para utilizar tanto en charmm	Para el uso en paralelo, es más complejo y depende tanto de la biblioteca (MPI) como de las convenciones locales en la instalación informática	Materiales inorgánicos. Diseño de materiales

24

de

de

NANOPARTÍCULAS USADAS EN LODOS DE PERFORACIÓN.

	herramientas de análisis y creación de modelos.		como en otros simuladores de dinámica molecular	Licencia con costo para usuarios académicos.	0
	Es un paquete con L licencia desarrollada O	$3 \sin x$	simulación Sander	Necesita la la determinación de	se utiliza para realizar
	por más de 40	JSA10.0.1	PMEMD,	cargas parciales	simulaciones a
	investigadores de		PMEMD.CUDA	mediante ajustes al	escala atomística
	distintas universidades		Es un paquete de	potencial	Química
AMBER	de Estados Unidos.		programas de	electrostático.	computacional
	Existen muchos		simulaciones molecular	Los valores que se	Simulación
	campos de fuerza		que incluye código	obtienen son	dinámica paralelo
	incorporados.		fuente y demostraciones	mínimos locales no	
	Este paquete posee			mínimos absolutos.	
	numerosos programas			La imagen que se	
	desarrollo y análisis de			molécula es estática	
	dinámica molecular			por lo cual los	
				cálculos no son	
				suficientes para	
				predecir el	
				comportamiento	
				dinámico del sistema	
				estudiando (método	
				cuántico)	
	Tiene interfaz gráfica L	inux	Solo es necesario	El uso no es común	Se utiliza para
	llamada VMD, que a su		parametrizar la	en la simulación de	realizar
	vez es estable y		de describir el tipe de	polielectrolitos y no	simulaciones a
	programas		interacción	reportado que lo	Ouímica
	Programas			reportatio que 10	Zummen

25

	Es un código en	El código fuente está en emplee	computacional
NAMD	paralelo de dinámica	c y c++, disponible para	Simulación
	molecular diseñado	modificaciones por	dinámica paralelo
	para simulaciones de	parte del usuario	Optimización
	alto desempeño de	Escalabilidad	
	sistemas	Da al usuario la	
	biomoleculares grandes	posibilidad de crear un	
		propio campo de fuerza	

3.2 LAMMPS

Lammps es un simulador de dinámica molecular MD de código abierto, en el cual se estudia la interacción de uno o un par de moléculas en estado líquido, solido o gaseoso; cuenta con un paquete de simulación de manera atomística para llevar a cabo la simulación molecular; descubierta y desarrollada por Sandia National Labs y Temple University en Filadelfia. Gráficamente este algoritmo de código abierto se puede representar de la siguiente manera en la figura (5).

Figura 5.

Algoritmo de código abierto



Existen infinidad de interacciones entre las cuales lammps presenta conjuntos atómicos, poliméricos, biológicos, de estado sólido (metales, cerámicas, óxidos), granulares, de grano grueso o macroscópicos utilizando una variedad de potenciales interatómicos (campos de fuerza) y condiciones de contorno, puede modelar sistemas 2d o 3d con solo unas partículas hasta millones o miles de millones.

Lammps se puede construir y ejecutar en una computadora portátil o de escritorio, pero está diseñada para computadoras en paralelo. Lammps se ejecutará en cualquier maquina paralela que admita la biblioteca de paso de mensajes MPI. Esto incluye cajas de memoria compartida y clústeres de memoria distribuida y supercomputadoras.

Lammps está escrito en c+, las versiones anteriores se escribieron en F77 Y F90; está diseñado para que sea fácil de modificar o ampliar con nuevas capacidades, como nuevos campos de fuerza, tipos de átomos, condiciones de contorno o diagnósticos.

En el sentido más general, lammps integra las ecuaciones de movimiento de newton para una colección de partículas que interactúan. Una sola partícula puede ser un átomo, una molécula, o un electrón, un grupo de átomos de grano grueso o un grupo de material mesoscopico o macroscópico, los modelos de interacción que incluye lammps son en su mayoría de corto alcance; también se incluyen algunos modelos de largo alcance.

Características generales

Ejecutar en un solo procesador o en paralelo Distribución de código abierto Se ejecuta desde un script de entrada Ejecutar una o varias simulaciones simultáneamente (en paralelo) desde un script Potenciales interatómicos Creación de átomos

Integradores

Diagnósticos

Modelos de réplicas múltiples

Conjuntos, restricciones y condiciones de límite.

Con este código abierto es primordial fijarle las condiciones iniciales al sistema como posiciones y velocidades iniciales para cada partícula haciendo un estudio determinista de la naturaleza de la interacción de las partículas.

Para lammps, se conocen 3 formas de incluir las configuraciones iniciales en la simulación:

- Generación de la geometría del solido con ciertos comandos incluidos en el paquete de lammps como (*lattice, créate_box, créate_atoms*).
- 2. Con la lectura de un archivo externo de posiciones llamado *input* mediante read_data
- Finalmente, mediante la reanudación de una configuración anterior determinada, mediante el comando *read_restart*.

Ya teniendo las condiciones iniciales y de contorno, se fijan los termostatos y/o baróstatos que cumplan con las condiciones termodinámicas del sistema, para luego conocer el paso de integración que proporciona el avance de la trayectoria al pasar el tiempo de cada una de las partículas por medio del cálculo de nuevas posiciones, velocidades y fuerzas, al tiempo que se van conociendo el resultado de otras propiedades de interés.

Cuando ya se presenta de manera iterativa la simulación hasta que llegue al equilibrio y finalice. Lammps proporciona un archivo de salida o también llamado *output* o *log.lammps* con

la información termodinámica y del espacio fasico dependiendo del formato elegido para la simulación.

Finalmente, las bases fundamentales para una simulación por medio de dinámica molecular son las siguientes:

Algoritmos de integración

Potenciales interatómicos

Control de presión y temperatura

3.2.1 Campo de fuerza CLAYFF

El campo de fuerza CLAYFF es importante para simulaciones de sistemas minerales hidratados y multicomponentes donde sus interfaces son soluciones acuosas. Existen simulaciones entre la fase fluida y la fase solida donde se combinan métodos de minimización de energía y dinámica molecular para describir su comportamiento, además de que a la fecha los resultados con CLAYFF reportan indicios positivos para un campo de fuerza adaptable y eficiente en las simulaciones moleculares en especial con interfaces de fluidos con arcilla y otras fases en relación con ella.

Un campo de fuerza proporciona información con ciertos parámetros adecuados para cálculos de energía y fuerza; dicha información está basada en:

Un listado de los tipos de átomos con sus respectivas cargas

Reglas de tipado de átomos, es decir número y naturaleza de los átomos conectados

Parámetros de energía potencial y formas funcionales para los componentes

Condiciones para algunos parámetros que no se presenta explícitamente

El campo de fuerza CLAYFF, conforma varios tipos de iteraciones entre ellas están la de Coulomb, de corto alcance y vinculadas, además de diferentes términos funcionales para proporcionar información de iteraciones adheridas tales como torsión y doblamiento de ángulos representados en la figura (6).

Figura 6.

Iteraciones en el campo de fuerza



Nota: Adaptado de Francisco Castro- Tópicos de materia condesada blanda- dinámica Molecular

Para el campo de fuerza CLAYFF, existen unos parámetros no adherentes, con sus respectivas cargas parciales, parámetros de energía y distancia para cada tipo de átomo, como se muestra en la siguiente tabla (2):

Tabla 2.

Especie	Simbolo	Carga	D ₀ (Kcal/Kmol)	R_0
Hidrogeno de agua	h*	0,4100		(A)
Hidrogeno de Hidroxilo	ho	0,425	0	0
Oxigeno de agua	٥*	-0,82	0,1554	3,5532
Oxigeno de Hidroxilo	oh	-0,95	0,1554	3,5532
Oxigeno puente	ob	-1,05	0,1554	3,5532
Oxigeno puente con sustitucion octaedrica	obos	-1,1808	0,1554	3,5532
Oxigeno puente con sustitucion tetrahedrica	obts	-1,1688	0,1554	3,5532
Oxigeno puente con doble sustitución	obss	-1,2996	0,1554	3,5532
Oxigeno de Hidroxilo con sustitución	obs	-1,0808	0,1554	3,5532
Silicio tetraedrico	Si	2,1000	1,841E-06	3,7064
Aluminio octaedrico	ао	1,575	1,330E-06	4,7943
Magnesio Octaedrico	mgo	1,36	5,03E-06	6,2484
Ion de sodio acuoso	na	1,000	0,1301	2,6378

Parámetros no adherentes para el campo de fuerza CLAYFF

Nota: Adaptado de cygan et, al; 2004. Molecular Models OF Hydroxide, Oxyhydroxide and Clay Phases and the Development of a General Force Field.

3.2.2 Potenciales de interacción

Existen fuerzas interactivas que controlan el sistema de átomos de manera precisa, siendo el pilar fundamental de los potenciales interatómicos en la dinámica molecular.

Actualmente se presentan diferentes modelos de potenciales interatómicos y para tener una certeza en su elección debido a que debe acoplarse de manera precisa, acertada y realista a la gran mayoría de datos como sea posible. Para el conjunto de sólidos, algunos datos podrían ser constantes de red, propiedades elásticas, energías de superficie, entre otros.

Con la ayuda de estos potenciales interatómicos se podrían fácilmente reproducir cuantitativa o cualitativamente datos experimentales reportados. Cualidades tales como el tamaño y geometría del conjunto de partículas, escalas de tiempo y cada uno de los recursos disponibles de computación dependen de una ágil evaluación de los parámetros y funciones del potencial interatómico.

Esos potenciales son aproximaciones para el cálculo de la energía potencial interatómica de un conjunto de pares de átomos, como la sumatoria de la energía potencial de una partícula con respecto a las otras partículas de todo el conjunto; como se representa a continuación:

$$F_{i=-\sum\frac{dV(rj)}{dri}}$$

Siendo F_i la fuerza total ejercida sobre la partícula i, $V_{(rj)}$ es el potencial que representa las interacciones del conjunto de estudio y r_i es la distancia interatómica de una partícula a otra partícula, siendo la una i y la otra j.

Es así como el potencial interatómico es implementado para conocer ciertos efectos causados sobre las partículas de manera dinámica y se pueden clasificar en:

Potencial de Lennard Jones (LJ)

Potenciales de Tersoff y Tersoff/ZBL

Airebo

Potencial de Morse

Potencial tipo Eam

Potencial esférico repulsivo

3.2.3 Control de las propiedades termodinámicas del sistema

Las características del sistema como la temperatura o la presión son importantes al momento de llevar a cabo una simulación utilizando dinámica molecular, ya que determinara el comportamiento termodinámico de dicho sistema y por consiguiente las condiciones que describirán la física. Por tanto, se hace la elección de los adecuados baróstatos o termostatos, que en mecánica estadística se les conoce como *conjuntos o colectividades*.

NVE: llamado conjunto microcanónico. Da a conocer durante la simulación que se mantienen constantes el número de partículas, el volumen, y la energía total, permitiendo variar otras magnitudes como la temperatura y la presión. Es un sistema que sigue las leyes de la dinámica clásica de Newton. Se utiliza para relajar el sistema en un proceso adiabático en el que no existe intercambio de calor.

NVT: llamado conjunto canónico. Indica los posibles estados de un sistema que está en equilibrio con un baño térmico a una temperatura dada. En este caso se mantienen constantes el número de partículas, el volumen y la temperatura. Permite variar tanto la presión como la energía del sistema. En LAMMPS se utiliza el método de Nose-Hoover para mantener la temperatura constante.

NPT: llamado conjunto isotermo-isobárico, se mantienen constantes el número de partículas, la presión externa y la temperatura del sistema. Su diferencia con el NVT es que a dicho conjunto se le permite cambiar la energía total del sistema y su volumen, donde se realizara en un sistema en equilibrio termodinámico a presión fija. Este conjunto se utiliza para ensayos en los que se quiere mantener una presión externa concreta, para relajar un sistema volumétricamente y para determinar la densidad.

Al establecer durante la simulación algún conjunto, LAMMPS puede añadir otro tipo de controles de presión o de temperatura sobre ciertas regiones dentro de la caja de simulación. Donde, por ejemplo, el reescalado de velocidades de las partículas implicadas pueda ajustarse a la nueva temperatura, usando el comando *temp/rescale*, alguno de los termostatos o baróstatos de Berendsen (*temp/berendsen*, *press/berendsen*) o la dinámica de Langevin, entre otros.

4. Criterios de selección de nanopartículas para el mejoramiento del filtrado

4.1 Nanopartículas

Son partículas microscópicas; unidades más grandes que los átomos y moléculas, varían de 1 a 100 nm de diámetro y cuentan con propiedades físicas excepcionales fácilmente manipulables; a parte de sus propiedades físicas también presentan propiedades potenciales convenientes para procesos de evaluación, recuperación y control de la formación.

4.1.1 Clasificación de las nanopartículas

Las nanopartículas se pueden obtener de diferentes tipos de materiales como el hierro, el oro, platino o de óxidos metálicos, en la actualidad las nanopartículas más utilizadas son las sintetizadas a partir de los iones de plata (AgNPs); debido a sus características fiscas (conductividad), químicas (estabilidad) y biológicas (actividad catalítica y antibacterial). Según la Agencia de Protección del Medioambiente, las nanopartículas y los nanomateriales pueden clasificarse como se muestre en la tabla (3):
Tabla 3.

Clasificación			Descripción		
		Natural Son todas las nanopartículas que se pueden encontrar			
Según	su		natural en la naturaleza, un ejemplo sería las nanopartículas		
procedencia			producidas en las erupciones volcánicas o espumas marinas.		
1		Incidental	Generadas por las actividades humanas, como emisión de gases		
			en procesos industriales o desechos producto de la combustión		
			de la gasolina en el motor de los vehículos.		
		Sintética	Producidas en laboratorios, a propósito, y con un fin de		
			investigación o desarrollo.		
Según	su	Orgánicos	Son las nanopartículas basadas en carbono como el grafeno, el		
naturaleza			fullereno, nanotubos de carbono, coloides orgánicos,		
química	nica nanopartículas poliméricas, negro de carbón, nar		nanopartículas poliméricas, negro de carbón, nano cristales de		
			celulosa, micelas, liposomas y dendrímeros.		
		Inorgánicos	Las nanopartículas inorgánicas no tienen una base de carbono,		
			pero si una mineral o metálica. Las nanopartículas inorgánicas		
			son atractivas debido a sus propiedades ópticas, electrónicas,		
			magnéticas y catalíticas únicas. En esta clasificación		
			encontramos los nano cristales, coloides silíceos, nanopartículas		
			de plata, oro, cobre y aluminio, nanopartículas de óxidos,		
			puntos cuánticos, nanoarcillas.		
Según	sus	Tri dimensional	Los electrones no están confinados y pueden moverse		
dimensiones			libremente.		
		Bi dimensional	Los electrones están confinados únicamente en una dirección.		
		Unidimensional	Lo electrones están confinados en dos dimensiones		
		dimensional			
		cero dimensional	Los electrones están confinados en las tres dimensiones		

Clasificación de las nanopartículas

Nota: Adaptado de Metodología para la caracterización de nanopartículas en aplicaciones de estimulación de pozos

de petróleo.

4.1.2 Nanopartículas aplicadas en los fluidos de perforación

Cada vez es más notorio el agotamiento de reservas, situación que genera ciertas limitaciones técnicas, tanto en la exploración como en la producción. debido a las nuevas estrategias que se han tenido que implementar para lograr el objetivo propuesto en las operaciones de perforación.

Es por ello que la industria está estudiando la implementación de polímeros o productos naturales que logren cambiar ciertas propiedades en el fluido, convirtiéndolo así en un fluido inteligente, pero también fuentes mecánicas físicamente pequeñas que cumplan con la estabilidad térmica y química necesaria para su uso en la etapa de perforación, logrando reducir significativamente algunos de los daños durante el proceso, los daños causados al medio ambiente y los costos a utilizar en toda la operación. Además, los fluidos que se emplean en las operaciones de perforación abarcan una fase liquida, una fase sólida y una fase química en sistemas complejos. Es por eso que la nanotecnología en procesos de perforación ha ido incrementando a gran escala, observándose de manera más detallada en la figura (7).

Figura 7.

Nanotecnología en procesos de perforación



Nota: Adaptado de SPE126101. Priority Assessment of Invesment in Development of Nanotechnology in Upstream Petroleum Industry

Los fluidos de perforación cumplen ciertas funciones como 1. Lubricar y enfriar la broca, 2. Transportar y sostener los recortes producidos en la formación, 3. Reducción de la fricción que se presenta entre la columna de perforación y las paredes del pozo para mantener la estabilidad de las secciones en las que aún no se cuenta con casing, 4. Obtención de núcleos para conocer cierta información acerca del yacimiento, 5. Evitar flujos indeseados a la formación, al tiempo que forma una torta delgada para proporcionar un sello temporal de los poros en la formación.

A la vez que cumplen ciertas funciones los fluidos de perforación deben contar con ciertas propiedades óptimas entre ellas las propiedades reológicas como la viscosidad, yield point, entre otras, y también el mantenimiento de rangos de presión y temperatura durante todo el proceso que experimentan los fluidos en cada una de las etapas que desarrolla la ingeniera.

Cuando se presenta una alteración de ciertas características o propiedades iniciales en una formación se le conoce como daño a la formación, debido a la presencia de fluidos de perforación y otros fluidos que se implementan en cada una de las etapas que se llevan a cabo durante los procesos de extracción y producción; razón por la cual es necesario conocer la formación y las propiedades adecuadas tanto de la formación como de los fluidos de perforación para evitar daños causados con su inadecuado diseño.

Por tal motivo, Quintero et al., 2011 según estudios de investigación da a conocer que al adicionar nanopartículas orgánicas e inorgánicas, como, nanotubos de carbono, oxido de magnesio, oxido de níquel, óxido de hierro, óxido de zinc, oxido de sílice, nanopartículas metálicas, nanopartículas a base de polímeros y mesoporosas, entre muchas otras a los fluidos de perforación causa un mejoramiento en sus propiedades físicas, reológicas y termodinámicas a diferencia de los fluidos base típicos sin adición, estos beneficios se deben a la gran relación área superficial/volumen que tienen las nanopartículas y la capacidad para causar una variedad de las

propiedades del fluido y principalmente la proporción necesaria en comparación con los aditivos que se requieren para poder lograr un mismo efecto.

La aplicación de nanopartículas inteligentes como aditivos en lodos de perforación mitigan distintas causas como daños de formación, perdidas por filtrado y espesores de torta no deseados; las nanopartículas cumplen una función importante en la química del lodo ya que debido a su naturaleza química y tamaño son ideales para su aplicación sin peligro de daño de formación indeseado. Convirtiendo así estos fluidos en fluidos inteligentes o también llamados nanofluidos o Smart Fluid; que se originan a partir de una dispersión de partículas sólidas y fibras dispersas en un líquido en un tamaño nanométrico; lo que permite una mejora en las propiedades térmicas, reológicas, eléctricas, entre otras de la base liquida a unas muy bajas concentraciones del nanomaterial.

Existen dos tipos de nanofluidos de acuerdo con sus aditivos, los nanofluidos simples o también con un solo tamaño o sola escala y los nanofluidos avanzados donde existe una variación de tamaños; estos fluidos también logran realizar exclusivamente una estricta función o varias funciones en los sistemas de fluidos y se denominan funcionales o multifuncionales respectivamente.

Por muchos años los fluidos de perforación han venido utilizando nanopartículas, debido a que las arcillas que se usan comúnmente son de origen natural. No obstante, en contraste con las nanopartículas, en estas su forma, composición química y tamaño se crean y chequean de manera sintética, logrando así un diseño de nanopartículas a nivel atómico, con especificaciones en sus grupos funcionales, tratando de que reaccionen a cualquier cambio en el entorno de exposición de manera provechosa. (S. Betancur Márquez, 2014) Por eso en los fluidos de perforación han venido utilizando nanopartículas, debido a que las arcillas que se usan comúnmente son de origen natural. No obstante, en contraste con las nanopartículas, en estas su forma, composición química y tamaño se crean y chequean de manera sintética, logrando así un diseño de nanopartículas a nivel atómico, con especificaciones en sus grupos funcionales, tratando de que reaccionen a cualquier cambio en el entorno de exposición de manera provechosa.

Por medio de la adición de nanopartículas y los sólidos de perforación se crea una estructura interna en la región cercana del pozo conocido comúnmente como retorta; ocasionando un mejoramiento en la permeabilidad, debido a que las nanopartículas interactúan con los sólidos a nivel nanométrico, manteniendo sus fuerzas eléctricas unidas; pero así mismo una vez destruidas las fuerzas manteniendo el control en la permeabilidad, las nanopartículas vuelven con facilidad a la región cercana al pozo gracias a su tamaño nanométrico.

En los fluidos de perforación no todas las nanopartículas tienen el mismo comportamiento, existen algunas nanopartículas que se desestabilizan a altas temperaturas y diferentes concentraciones. En la siguiente tabla (4) se presentan algunas de las nanopartículas estudiadas a nivel experimental han mostrado resultados favorables en los fluidos de perforación.

Tabla 4.

Nombre	Formula química	Características	Aplicaciones
		Aumento de la viscosidad plástica.	
		Reducción del punto de fluencia al	
		aumentar la concentración.	
		Reducción de la pérdida de líquido y	Mejoramiento de las
Oxido de	TiO_2	espesor de la retorta.	propiedades
Titanio		Estructura cristalina, amorfa parciales	reológicas de los
		semicristalinas.	fluidos de
		Mejoramiento de la movilidad de las	perforación a base de
		partículas.	agua
		Diferentes comportamientos en ciertas	
		temperaturas.	
		Mejoramiento de las propiedades de	
		conductividad térmica y eléctrica.	
,		Reducción significativa de la perdida de	Mejoramiento de las
Óxido de zinc	ZnO	filtrado en condiciones de baja presión y	propiedades
		temperatura.	reológicas de los
		Reducción en el esfuerzo de corte	fluidos de
		Mantiene suspensión estable.	perforación a base de
		Según resultados de pruebas de	agua
		sedimentación las partículas son estables	
		en la precipitación.	
		Podrían considerarse un aditivo para	
		fluidos de perforación más respetuoso con	
		el medio ambiente.	Mejoramiento de las
		Presenta buena consistencia a	propiedades
	CuO	temperaturas altas en los fluidos.	reológicas de los
Oxido de		Maneja una buena conductividad térmica	fluidos de
cobre		Mejoramiento de la estabilidad térmica a	perforación a base de
		temperaturas relativamente altas.	agua

Nanopartículas en lodos de perforación

			reducción de la viscosidad del petróleo		
			pesado.		
			Alternancia de humectabilidad.		
			Mejora las propiedades Reológicas a	Mejoramiento de las	
			temperaturas elevadas.	propiedades	
Magnetita		Fe ₃ O ₄	Disminución de la perdida de líquido en	reológicas de los	
			condiciones de HPHT.	fluidos de	
				perforación a base de	
				agua.	
			Para lechada de cemento		
			Fracturamiento hidráulico		
			Disminución de la perdida de fluidos	Mejoramiento de las	
			Aumento del límite elástico	propiedades	
		MgO	Se requiere más investigación reológica	reológicas de los	
Oxido	de	-	para evaluar sus capacidades	fluidos de	
Magnesio			Aumentando concentración, el PH se	perforación a base de	
-			mantiene constante	agua	
			Afectan negativamente la perdida de	-	
			liquido		
			Mejoramiento en las características de		
			filtración		
			Aumento del punto de fluencia	Mejoramiento de las	
			Aumento viscosidad plástica	propiedades	
		Fe ₂ O ₃	Reducción fuerza de arrastre	reológicas de los	
Óxido	de		Mejora las propiedades del filtrado sin	fluidos de	
hierro			tener ningún efecto sobre las propiedades	perforación a base de	
			reológicas en el fluido a base de aceite	agua	
			Mejoramiento en el límite elástico		
			Incremento de la conductividad térmica	Mejoramiento de las	
			Aumento en el límite elástico	propiedades	
			Aumento en la resistencia de gel	reológicas de los	
Oxido	de	Al ₂ O ₃	Reducción en el volumen del filtrado	fluidos de	
Aluminio			Al aumentar la concentración, el PH se	perforación a base de	

			reduce ligeramente	agua
Oxido	de	SiO ₂	Debido a su química establecida que se	
Sílice			puede alterar fácilmente para evitar	
			reacciones de fluidos con fluidos de	
			formación.	
			Mejoramiento de las características de	
			filtración.	
			Reducción del límite de fluencia general	
			de fluidos.	
			Estabilizar lodos de perforación de	
			emulsión inversa en operaciones HPHT	
			con potencial de inhibición incluso en	
			concentraciones bajas.	
			Alta estabilidad térmica	
			Enfoques exitosos para perforar a través	
			de formaciones reactivas.	
			Taponamiento de poros.	
			Deshidratación osmótica.	

Algunos de los problemas asociados a la etapa de perforación se han reducido gracias a los resultados obtenidos en la adición de nanopartículas a los fluidos de perforación. Según Abdo et. 2010. utilizaron la adición de nanopartículas en los fluidos de perforación, realizando cambios en su reología, específicamente (plasticidad y viscosidad), mediante variación en la composición, tamaño o tipo de nanopartícula. Con la facilidad de las nanopartículas de adaptarse a cualquier medio se garantiza la reducción de costos y se produce un mejoramiento del funcionamiento de los fluidos de perforación.

Con la realización de estudios sobre el uso de nanopartículas en el rendimiento de los fluidos de perforación, varios autores, entre ellos Saboori et al. 2012. Realizó investigaciones sobre el estudio de las causas que ocurren al adicionar nanopartículas de sílice funcionalizadas

con carboximetilcelulosa (CMC), a los fluidos de perforación, especialmente causas como espesor de la torta y el control en el filtrado en la formación. Estos fluidos fueron llevados a pruebas como la prueba de filtrado API, que consta del uso de un equipo conocido como filtro prensa; mostrando una disminución del 65% en el espesor de la torta y un 7% en el control de pérdidas de filtrado. Zakaria et al. 2012. Estudiaron con nanopartículas comerciales de tamaños entre 20 y 40 nm donde reducen el filtrado debido a su capacidad para el bloqueo de los poros de la formación gracias a su interacción con las partículas de arcilla presentes; este estudio se realizó mediante dos pruebas, una para fluidos de perforación base aceite y la otra para fluidos de perforación base agua; los resultados arrojados con materiales comerciales utilizados para tal fin con un 9% en su reducción. Además, Jung et al. 2011. Reportaron algunos beneficios importantes al agregar nanopartículas comerciales a los fluidos de perforación base agua, mostrando un mejoramiento en las propiedades reológicas (Viscosidad dinámica) a condiciones de yacimiento.

5. Selección de nanopartícula

La nanotecnología ha sido importante en el desarrollo de la industria petrolera en especial de la ingeniería de petróleos, y específicamente del funcionamiento de la Nanosílice como controlador del filtrado.

Las nanopartículas de sílice, conocidas también como nanosílice, usadas como aditivo en los lodos de perforación se ha estudiado desde la década de los noventa con múltiples resultados. "Con la intención de contribuir al desarrollo con la elaboración de productos que se desempeñen de manera más eficiente ha incentivado a los investigadores a entrar en ramas de la nanotecnología y ver qué utilidad puede tener en la reología, la perdida por filtrado y la mejora del sistema o estabilidad de las lutitas de los lodos de perforación".

Lo que más caracteriza la nanosílice en solución acuosa respecto a la microsílice convencional es que es un producto líquido. Se trata de una suspensión de sílice coloidal en agua, libre de cloruros y con bajo contenido de álcalis, característica que lo determina como un producto sin riesgo de toxicidad, su composición es de 28% de nanosílice activa y 72% agua, con una densidad de 1,3 g/cm³, además no es inflamable.

Las nanopartículas de sílice son utilizadas en la estabilización de los lodos de perforación con emulsiones invertidas para altas presiones y temperaturas HTHP, inclusive a concentraciones bajas. Amanullah y Al-Tahini, 2009. Para obtener una eficiencia favorable durante la perforación se requiere una viscosidad plástica baja, debido a que la viscosidad va aumentando de manera paulatina por la presencia de recortes; al adicionar nanosílice a los fluidos de perforación base agua, según estudios hechos por Jain y col. (2015) y Ismail y col. (2016), los rangos de viscosidad plástica para un fluido de perforación con adición de nanopartículas no deben exceder los 18 a 29 centipoise a 78 °F, con el fin de garantizar la correcta circulación sin provocar

pérdidas de presión debido a la fricción. Con los resultados obtenidos en las pruebas experimentales realizadas por Henry Elochukwu, Raoof Gholami, Sharul Sham Dol, afortunadamente su viscosidad plástica se encontraba dentro del rango para un lodo con adición de nanosílice, además para un 2% en nanosílice se observó que la torta de filtrado se redujo en 33.3% a condiciones de LPLT. Comparando con el mismo valor en peso de nanosílice se encontró una reducción del mud cake en 45,2% a condiciones de HPHT, referenciados a un fluido base.

5.1 Generalidades de la nanotecnología y las nanopartículas de sílice

M. Roco, director de la iniciativa Nacional en Nanotecnología (NNI) de los Estados Unidos, en el consejo nacional de Ciencia y Tecnología en septiembre de 1999, da por hecho que la nanotecnología es "la investigación y desarrollo a nivel atómico, molecular y supramolecular, que proporcionan entendimiento fundamental de los fenómenos y los materiales a nano escala, tamaños entre 1 a 100 nm, para realizar estructuras y sistemas que presentan nuevas propiedades y funciones a su tamaño nano.

Los Nanofluidos son dispersiones coloidales estables y en la ingeniería de petróleos y en la industria como tal se han hecho pruebas a nivel laboratorio para la mejorara de los lodos de perforación en aspectos como la disminución en la perdida de filtrado, disminución de la torta; la Nanosílice es un aditivo que se le adiciona al cemento para disminuir la porosidad. Existen diferentes tipos de Nanofluidos cada uno según sea su necesidad.

Sílice, es el nombre que se le da comúnmente al Oxido de silicio (SO_2), el cual se encuentra en diferentes formas: amorfo o cristalino figura (8), porosos y no porosos, anhidro e hidroxiliado. Estructuralmente el átomo de Si está formado tetraédricamente con cuatro átomos de oxígeno y con múltiples estructuras que se pueden construir. "la sílice es sintetizada en una solución acuosa, por medio de la disociación del ácido de sílice o del compuesto del vapor de silicio".

Figura 8.

Estado del dióxido de Silicio.



Nota: Adaptado de Cristales vía a la Armonización y a la Liberación de Patrones Automáticos de Conducta. Adaptado de: http://www.artinaid.com/wp-content/uploads/2013/03/Di%C3%B3xido-de-Silicio.png

Figura 9.

Imagen de Laboratorio.



Nota: Adaptado de GAIA Nanosílice. Ficha técnica.2008.

Las nanopartículas de sílice son partículas de tamaño nanoescalar entre 1- 100 nm, en la anterior figura (9) podemos observar la imagen tomada en laboratorio de nanosílice a 100nm.

En consideración a la perdida de fluido, el estudio se ha focalizado en la eficiencia de carga, rentabilidad y estabilidad térmica. "Las nanopartículas utilizadas para la modificación reológica y control del volumen del filtrado se encuentran numerosas y variadas para la aplicación en lodos de perforación".

El uso de nanopartículas de sílice en la industria del petróleo en Colombia aún se encuentra limitada a procesos de prueba en laboratorios con algunos pilotos en campos petroleros, sin embargo, en América del Norte, Canadá y Rusia, la nanotecnología ha tenido una aceptación significativa en varios procesos industriales en la transformación de la materia y principalmente en la industria del petróleo, asimismo se han realizado investigaciones en el uso de nanopartículas de sílice en fluidos de perforación base agua.

En 2009, Sensoy T., Chenevert M. y Mukul M. Sharma realizaron sus estudios basado en el uso de nanopartículas para minimizar el filtrado en los shales. "Se utilizaron nanopartículas de óxido de sílice con tamaños de 17 - 20 nm y llegaron a la conclusión que hubo una disminución de perdida de fluido de circulación de un 17- 27%".

En 2011, Javeri et al, se realizaron estudios para prevenir la perdida de fluido de perforación base agua y el espesor de la torta usando nanopartículas inorgánicas, con lo que se obtuvieron resultados de una "reducción de un 34% del espesor de la torta, reducción en la viscosidad plástica como del punto de cadencia de 7% y 20%, respectivamente"; ya que por su tamaño de partícula tiene una mayor relación área superficial – volumen, sin aportar peso ni viscosidad, teniendo como resultado un fluido más limpio.

En 2012, Saboori R., Sabbaghi S., Mowla D. & Soltani A., se realizaron dos estudios muy importantes usando nanopartículas de sílice; el primero estuvo enfocado en la "disminución del filtrado del lodo y espesor de la torta"; y la segunda enfocada en el uso de fluidos de perforación con adición de nanopartículas para mejorar su desempeño. Los dos estudios realizados fueron favorables, ya que en las dos investigaciones se redujo el filtrado en más de un 50%.

En 2014, la Universidad Nacional, sede Medellín se desarrollaron varias pruebas en el laboratorio a fin de mejorar el desempeño de los fluidos de perforación y sus características a partir de nanopartículas funcionalizadas. "se realizaron estudios desde la síntesis de nanopartículas de sílice hasta su comportamiento en el laboratorio, arrojando resultados de una disminución del filtrado en un 23%, y el espesor de la retorta en un 70%".

La obtención de nanopartículas es un proceso de múltiples pasos en la que la solución de silicato alcalino se neutraliza parcialmente con un ácido mineral. Generalmente, la neutralización de PH se puede lograr por electrodiálisis. "La suspensión de sílice resultante se estabiliza mediante el ajuste del PH. Finalmente, una concentración de solidos de hasta 50% en peso se logra por la evaporación del agua".

En 1968, Werner Stober y Arthur Fink realizaron un método simple para la obtención de nanopartículas de sílice a partir de la policondensación de TEOS (Tetraetil Ortosilicato) en un medio alcohólico, usando catalizadores de amoniaco.

Las reacciones de condensación empiezan antes de que la hidrolisis se complete. Se utilizan alcoholes como medio de reacción debido a la inmiscibilidad de los alcoxilicatos y el agua, siendo necesario un disolvente común a ambos como agente homogenizante. Posterior a esto se han realizado diversas investigaciones del uso de nanopartículas en la industria del petróleo, y especialmente en lodos de perforación con el fin de mejorar sus características fisicoquímicas y las propiedades de los fluidos.

Las nanopartículas de sílice son utilizadas como una herramienta que logra la disminución de la penetración del agua en los poros de la roca un claro ejemplo es observado en la figura (10), debido a su funcionalidad las nanopartículas de sílice deben ser compatibles con otros aditivos químicos, manteniendo la estabilidad térmica y la reológica del sistema.

Figura 10.

Solución acuosa con Nanosílice



Nota: Adaptado de Nanopart6ículas de Sílice en los poros de la formación.

Megghan Riley, Emanuel Stamatakis y Steve Young, en su artículo "Wellbore Stability in Unconventional Shale" en 2012, diseñaron un fluido de perforación base agua con adición de nanopartículas de sílice arrojo un resultado de una disminución del 98.9% de la permeabilidad, debido a que las nanopartículas hicieron sello en las fracturas de $10 - 50 \mu m$ presentes en las arcillas Marsellus de Texas. Como se puede observar en la siguiente figura (11), a medida que crece la concentración de nanopartículas de sílice en peso (m%), la permeabilidad va decreciendo sin aumentar la presión que el lodo ejerce sobre la formación, lo que significa que las nanopartículas de sílice cumplen con la función de obstruir las gargantas de los poros que estén interconectados en la formación, manteniendo la estabilidad de la formación mientras se está perforando. El nano material muestra también un buen efecto tapón en presencia de fracturas de longitudes largas.

Figura 11.

Efecto de taponamiento de fracturas con diferentes concentraciones de Nanosílice.



Nota: Adaptado de RILEY Meghan., et al, Wellbore Stability in Unconventional shale- The Design of a Nanoparticle Fluid. En: SPE Oil and Gad Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers, SPE 153729. (Marzo, 2012). p 3. Modificado por autor.

5.2 Ventajas de las nanopartículas de sílice en el control del filtrado del lodo base agua

La manipulación de las propiedades de la materia a nano escalas ofrece estudios con resultados diferenciales, y en solución acuosa se puede encontrar:

Estabilidad en pozos horizontales en formaciones arcillosas, perforados con fluidos base agua; esto se debe a que las Nanopartículas de sílice taponan las fracturas y poros de tamaños nanométricos impidiendo que la fase liquida reaccione con la formación.

Los lodos de perforación con adición de nanopartículas de sílice brindan excelentes propiedades reológica que se mantienen en el tiempo.

Las nanopartículas de sílice son un material biodegradable, no son toxicas, son fácilmente sintetizables, aportan estabilidad térmica y lubricidad al fluido de perforación.

Para la recuperación mejorada de petróleo las nanopartículas de sílice están clasificadas como el material que obtiene un mayor porcentaje de recobro de petróleo residual a nivel de simulación y laboratorio.

El fluido de perforación basado en nanopartículas de sílice reduce la abrasión gracias a sus propiedades lubricante.

Típicamente los coloides de nanopartículas son modificados para mantener la eficiencia del fluido haciendo el trabajo de varios químicos superficiales y también proporcionando una mayor estabilidad de fluidos en ambientes de deposición difíciles. Las nanopartículas de sílice cambian las propiedades del fluido haciéndolo mejor estructurado para manejar criterios de temperatura, acidez, y lubricidad.

Las Nanopartículas de Sílice son de naturaleza inorgánica como lo son las nanopartículas de Óxido de Aluminio (*Al2O3*), Óxido de Níquel (*N2O3*), entre otras, las cuales tiene diferentes usos en la industria, sin embargo, "hay que tener en cuenta que como las nanopartículas son sólidos, siempre van a necesitar un fluido que las transporte; puede utilizarse agua destilada, salmuera o etanol como medios de dispersión".

Para las nanopartículas de sílice están:

El Óxido de Silicio hidrófobo (*SiO*2 (S)) no puede ser dispersado en agua destilada y salmuera porque necesita un solvente orgánico por su naturaleza hidrófoba. Tiene la propiedad de modificar la mojabilidad de la roca y disminuye la tensión interfacial entre el agua y el aceite aumentando el recobro de aceite residual.

Óxido de Silicio tratado con sileno (*SiO*2 (S)), se debe dispersar en salmuera para incrementar el factor de recobro.

Figura 12.

Metodología de Simulación.



6.1 Estructura cristalográfica de la montmorillonita

La montmorillonita pertenece al grupo de las esmécticas dioctaédricas, gracias a su potente catalizador presente en su superficie, la montmorillonita es muy utilizada como materia prima (Pinnavaia 1983; Konta 1995). Existen suelos contaminados por los metales pesados presentes y debido a la interacción que tiene la montmorillonita con estos metales ha tomado un uso fundamental en esas áreas de preocupación ambiental. (Baker y Senft 1995).

Con la ayuda de los datos cristalográficos, coordenadas atómicas, posiciones, entre otras sacadas del articulo Phys Chem Minerals (2008) 35; se obtuvo la estructura cristalográfica de la montmorillonita utilizando el software OVITO figura (12) para este proceso.

Figura 13.

Estructura Cristalográfica Montmorillonita.



Nota: Propia software OVITO

6.2 Estructura cristalográfica de la nanopartícula de sílice

En la década de los 90, más específicamente por los años de 1980, el auge de los métodos numéricos informáticos ha sido importante en la simulación de propiedades como volumen y superficie; a pesar de que se han producido algunos desarrollos en avances con el trascurso de los años aún se tienen déficits sustanciales. La sílice está muy presente en la naturaleza por sintetización, además de encontrarse de manera biológica en ciertos organismos; también la sílice es muy utilizable para el relleno en nanocomposites y en neumáticos, así como en soportes de catalizadores. (C. Chem. Soc. Rvdo. 2009).

Para la creación de la estructura cristalográfica de las nanopartículas sílice se tomaron los parámetros de unión para la superficie mostrados a continuación en la tabla (5). Después de crear la estructura cristalográfica de la nanopartícula se utilizó el programa crystallographic tool for the construction of nanoparticles en el que se crean moléculas de acuerdo con las condiciones deseadas; para este caso se seleccionó una nanopartícula de 14 angstrom de diámetro, debido a que en la literatura el rango para simulaciones de este tipo se encuentra entre 10 - 20 angstrom de diámetro. Tomado del articulo SPE 146979 "Decreasing water invasion into Atoka shale using Nonmodified Silica Nanoparticles" by J. Cai, SPE

Figura 14.

Estructura Cristalográfica Sílice.



Nota: Propia software Vesta

6.3 Modificación de las estructuras cristalográficas

En este paso fue necesario el ajuste de cada una de las estructuras cristalinas; para la estructura cristalina de la nanopartícula de sílice se distinguen 5 tipos de átomos con entornos químicos diferentes que sirven como modelo para las propiedades de superficie y volumen concordando con las mediciones experimentales, razón por la cual se realizó el ajuste a la estructura de acuerdo a las necesidades de estudio; para el caso de la estructura cristalina de la montmorillonita se agregaron algunos grupos hidroxilos debido al campo de fuerza con el que se trabajó en la simulación.

Figura 15.

Tipos de átomos en el modelo de la sílice.



Nota: Adaptado de Force Field and a Surface Model Database for Silica to Simulate Interfacial Properties in Atomic Resolution.

6.4 Parametrización de la montmorillonita de acuerdo con el campo de fuerza utilizado

Para iniciar una simulación en lammps es necesario la creación del archivo de entrada de acuerdo con los parámetros requeridos en lammps siendo uno de ellos el campo de fuerza a utilizar; en esta sección se modifica el archivo inicial con la nomenclatura del campo de fuerza CLAYFF, mostrado en la tabla (2), además también fue necesario incluir ángulos, enlaces, coeficientes y masas atómicas en el input de entrada a lammps.

6.5 Método de simulación para validar el modelo de lodo base

Para la validación del modelo base se inició con el proceso de una caja de simulación con dimensiones a = 5,175(A); b = 8,896(A); c = 121,34(A), en la que se agregó de manera manual la montmorillonita para después realizar la adición de agua a partir de la densidad escogida debido a la mínima cantidad de agua requerida en la caja de simulación. Se realizó la simulación en lammps para 3 modelos iniciales con cantidades diferente de agua, la primera para 400, la segunda para 500 y la tercera para una cantidad de aguas de 600, como se referencia en los apéndices (A).

Figura 16.

Modelo del lodo base.



Nota: Propia software Vesta.

6.6 Parametrización de las nanopartículas de sílice de acuerdo con el campo de fuerza utilizado

Con un campo de fuerza es más factible las predicciones computacionales con un porcentaje de exactitud considerable de las propiedades interfaciales acuosas de todos los tipos conocidos de sílice, logrando así tener resultados que corroboren los métodos experimentales. Para tener una amplia gama aplicable en biomoléculas, polímeros y materiales inorgánicos se requiere de ciertos parámetros integrados en variedad de campos de fuerza como un ejemplo, (AMBER, CHARMM, COMPASS, CLAYFF, OCFF entre otros).

Para el montaje de moléculas se estudian las variaciones tanto en la cantidad como en la profundidad de la disociación de los cationes superficiales para las interfaces sílice-agua

correlacionando con mediciones del potencial z y creando entornos acuosos para la adsorción y autogestión. (Heinz, H.; Lin. T. Emami, FSLangmuir, 2013).

Igualmente, que, para la montmorillonita, para la nanopartícula de sílice también se modificó el archivo de entrada con todos los parámetros necesarios para una correcta simulación en lammps; estos parámetros se especifican en la tabla (5).

Tabla 5.

tino	angulo $E_{\theta} = K_{\theta}(\theta)$	$\theta_{ij} - \theta_{0,ij}$
tipo	<i>K_θ</i> (kcal/mol <i>rad</i>)	$ heta_0$ (°)
O-SI-O	100	109,5
SI-O-SI	100	149
SI-O-H	50	115
tino	enlace $E_r = K_r(x)$	$r_{ij} - r_{0,ij}$)
tipo	K_r (kcal/mol ${ m \AA}^2$)	$r_{0,ij}$ (Å)
Si-O	285	1.68, 1.65
O-H	495	0,945

Parámetros adheridos para la nanosílice.

Nota: Adaptado de Force Field and a Surface Model Database for Silica to Simulate Interfacial Properties in Atomic Resolution.

6.7 Método de simulación para validar el modelo de las nanopartículas de sílice

Para la validación de la nanopartícula de sílice se toman las coordenadas reportadas en el archivo generado por el software VESTA, seguido a esto se crea un input de entrada a lammps donde se corre la minimización y el equilibrio de la nanopartícula; arrojando resultados de energía, densidad y volumen comprobando la validez del modelo de lodo base con la adición de la nanosílice. Datos reportados en el apéndice (B).

6.8 Simulación modelo base con adición de nanopartículas de sílice

Para la simulación del modelo base con adición de la nanopartícula se aumentó las dimensiones de la caja para a = 15,125(A); b = 26,688(A); c = 150(A), debido a que el tamaño de la nanopartícula de 14 Angstrom de diámetro superaba las dimensiones anteriores de la caja figura (15), seguido a esto se agregaron manualmente la montmorillonita y la sílice manteniendo fija sus posiciones, para luego agregar el agua de acuerdo con la densidad requerida. Los modelos para simular con estas dimensiones fueron de 3599 aguas para el primer modelo, 4499 para el segundo y 5399 para el tercero. Figura (16).

Figura 17.

Modelo de lodo base con adición de nanopartícula.



Nota: Propia software Vesta.

Después de generado el archivo en Vesta, se abre por medio de Atom para visualizarlo y así extraer las coordenadas de la nanosílice figura (17), creando un nuevo documento con dichas coordenadas. Posterior a esto se agrega manualmente los grupos hidroxilos en Atom para el campo de fuerza CLAYFF, con sus respectivos ángulos, enlaces y coeficientes. Posteriormente, se crean los inputs de entrada a lammps para los modelos a validar apéndice (C) y finalmente realizar la comparación con los modelos de lodo base y los experimentales.

Figura 18.

Modelo de lodo base con extracción de la nanosílice.



Nota: Propia software VMD.

7. Resultados y análisis de resultados

7.1 Validación de los modelos

7.1.1 Validación del lodo base

Se inicia la simulación durante un tiempo aproximado de 5 (ns), para validar el modelo estructural de lodo base, donde se calculan propiedades específicas, tales como: densidad (g/cm^3) , volumen (cm^3) y energía (J) del lodo base. Una vez terminado el proceso de simulación de dichas propiedades se inicie el cálculo de la viscosidad aparente (cp) de todo el sistema durante un tiempo relativo de 16 (ps) a condiciones estándar de presión y a temperaturas de 300K y 500K. Apéndice (D).

En la figura (18, 21) se puede observar una disminución de energía, debido a que los átomos en ese paso de tiempo están buscando alcanzar su estabilidad; sin embargo, después de ese paso de tiempo las interacciones atómicas del sistema han logrado la estabilización, puesto que los átomos que se encontraban en movimiento han alcanzado su máxima relajación haciendo que las interacciones sean más efectivas a la hora de la simulación. Posteriormente se presentan los resultados de volumen figura (19, 22) y densidad figura (20, 23) de la validación de la estructura del lodo base.

Figura 19.

Resultados de la Energía vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python.

Figura 20.

Resultados del Volumen vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python.

Figura 21.

Resultados Densidad vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python.

Figura 22.

Resultados del Energía vs Tiempo a 500K.



Nota: Propia Python.

Figura 23.



Resultados del Volumen vs Tiempo a 500K.

Nota: Propia Python.

Figura 24.

Resultados del Densidad vs Tiempo a 500K.



Nota: Propia Python.

Para el cálculo de la viscosidad se utilizó el método de perturbación periódica (PPM) explicado en el apartado 3.4.3, seleccionando 5 datos aleatorios de amplitud; estos datos fueron tomados variando el valor original sumando y restando el 75% y 50% respectivamente.

Con los valores seleccionados de amplitud se crea un input en Lammps para el cálculo de viscosidad apéndice (E), se toman los últimos valores para promediarlos por el método de promedio de bloqueo ecuación (9) y su respectiva desviación estándar con los resultados arrojados por la simulación tabla (6, 7).

Tabla 6.

Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 300K.

	Amplitud (ns/ps^{-2})	Viscosidad (<i>cp</i>)
	5,00E-06	10.424 ± 0.2805
Lodo	3,75E-06	11.023 ± 0.2433
Base a 300K	2,50E-06	11.486 ± 0.2028
	6,25E-06	9.894 ± 0.2744
	1,26E-06	12.195 ± 0.1989

Tabla 7.

Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 500K.

	Amplitud (ns/ps^{-2})	Viscosidad (cp)
	5,00E-06	10.923 ± 0.2723
Lodo	3,75E-06	11.307 ± 0.2545
Base a SOUK	2,50E-06	10.933 ± 0.1924
	6,25E-06	9.638 ± 0.2621
	1,26E-06	11.398 ± 0.1993

Según el Manual de fluidos de perforación (2002) capítulo 10, los rangos de un lodo base agua – montmorillonita para propiedades de densidad y viscosidad se presentan en la tabla (7). La simulación arrojo un valor de densidad de 1,09 g/cm^3 ; debido a que en la industria se reportan unidades de densidad en lb/gal, se realiza la conversión correspondiente obteniendo un valor de densidad incluido en la tabla (8).

Tabla 8.

Resultados de Viscosidad y Densidad experimentales y simulados a 300K y 500K.

Propiedad	Rangos Expemiemtales	Rangos Simulados a 300K	Rangos Simulados a 500K
densidad (<i>lb/gal</i>)	8.5 - 10	9,0965	7,704
Viscosidad		11.023 ± 0.2433	11207 ± 0.2545
Aparente	11 - 21.5	11.486 ± 0.2028	11.307 ± 0.2343 11.398 ± 0.1993
(<i>cp</i>)		12.195 ± 0.1989	

7.1.2 Validación de la nanopartícula de sílice

Para validar el modelo estructural de la nanopartícula de sílice, se calculan propiedades específicas tales como: densidad (g/cm^3) , volumen (cm^3) y energía (J) de la nanopartícula de sílice. Apéndice (F).

A medida que transcurre el tiempo de simulación en la figura (24) se evidencia la estabilización de la energía para la validación de la estructura; igualmente en las figuras (25, 26), se representan las variaciones de volumen y densidad.

Figura 25.

Resultados de Energía vs Tiempo.



Nota: Propia Python.

Figura 26.

Resultados de Volumen vs Tiempo.



Nota: Propia Python.

Figura 27.

Resultados de Densidad vs Tiempo.



Nota: Propia Python

7.1.3 Validación de los modelos de lodo base con adición de nanosílice

Para validar el modelo estructural de lodo base con adición de nanosílice, donde se calculan propiedades específicas tales como: densidad (g/cm^3) , volumen (cm^3) y energía (J) del lodo base con adición de nanosílice. Una vez terminado el proceso de simulación de dichas propiedades se inicie el cálculo de la viscosidad aparente (cp) de todo el sistema durante un tiempo relativo de 16 (ps) a condiciones estándar de presión y a temperaturas de 300K y 500K.

En la figura (29, 32), se puede observar una disminución de energía, debido a la inestabilidad de los átomos en los primeros pasos de tiempo hasta lograr el equilibrio. Posteriormente se presentan los resultados de volumen figura (27) y densidad figura (28) de la validación de la estructura del lodo base con adición de nanosílice.

En las figuras (30, 31), se muestra el proceso de estabilización de las propiedades de volumen y densidad en las que se observa una desestabilización en los primeros pasos de tiempo

debido a los efectos causados por la adición de la nanosílice al fluido base y a la variación de la temperatura. Con el paso del tiempo cuando los átomos encuentran su estado de equilibrio, se logra la estabilización de dichas propiedades apéndice (G).

Figura 28.





Nota: Propia Python
Figura 29.



Resultados de la Densidad vs Tiempo a 300K.

Nota: Propia Python

Figura 30.

Resultados de la Energía vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python

Figura 31.

Resultados de la Volumen vs Tiempo a 500K.



Nota: Propia Python

Figura 32.

Resultados de la Densidad vs Tiempo a 500K.



Nota: Propia Python

Figura 33.



Resultados de la Energía vs Tiempo a 500K.

Nota: Propia Python

Para el cálculo de la viscosidad se empleó el método explicado en la sección 3.4.3 y se desarrolló de la misma manera que para la viscosidad del lodo base. A continuación, se presentan los resultados obtenidos a diferentes amplitudes y temperaturas. Tablas (9,10).

Tabla 9.

Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 300K.

	Amplitud (ns/ps^{-2})	Viscosidad (cp)
	5,00E-06	14.509 ± 0.3366
NANOSILICE A 300K.	3,75E-06	15.096 ± 03057
	2,50E-06	15,701 ± 0.3230
	6,25E-06	14.004 ± 0.3472
	1,25E-06	16.362 ± 0.3087

Tabla 10.

	Amplitud (ns/ps^{-2})	Viscosidad (cp)
	5,00E-06	13.775 ± 0.3365
LODO BASE + NANOSILICE A	3,75E-06	14.270 ± 03148
500K.	2,50E-06	14.6507 ± 0.2976
	6,25E-06	13.200 ± 0.3411
	1,25E-06	15.132 ± 0.2802

Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 500K.

Según Henry Elocgukwu, Raoof Gholami, Sharul Sham Dol en el paper denominado "An approach to improve the cuttings carrying capacity of nanosilica based muds" y Stefanía Betancur Márquez en su proyecto de investigación de la universidad Nacional de Colombia sede Medellín denominado "Mejoramiento de los fluidos de perforación usando nanopartículas funcionalizadas: reducción de las pérdidas de filtrado y del espesor de la retorta", los rangos de un lodo base agua – montmorillonita con adición de nanosílice para propiedades de densidad y viscosidad se presentan en la tabla (8). La simulación arrojo valores de densidad de 1,1174 g/cm^3 a 300K y 0,9231 g/cm^3 a 500K, debido a que en la industria se reportan unidades de densidad en lb/gal, se realiza la conversión correspondiente obteniendo un valor de densidad incluido en la tabla (11).

Tabla 11.

Propiedad	Rangos Expemiemtales	Rangos Simulados a 300K	Rangos Simulados a 500K
Densidad (<i>lb/gal</i>)	9.00 - 10.0	9,325	7,704
		14.509 ± 0.3366	
Viscosidad Aparente (<i>cp</i>)		15.096 ± 0.3057	14.270 ± 0.3148
	13.87 - 17.74	15.701 ± 0.3230	14.651 ± 0.2976
		14.004 ± 0.3472	15.132 ± 0.2802
		16.362 ± 0.3087	

Resultados de Viscosidad y Densidad experimentales y simulados a 300K y 500K.

7.2 Análisis de resultados

En esta sección se presenta el análisis de los datos obtenidos en la simulación para un fluido base y un fluido con adición de nanosílice a 300 k y 500k de temperatura.

Para el lodo base con adición de nanopartículas el resultado de la densidad a una temperatura de 300K tuvo un aumento del 0,2285 *lb/gal*, con respecto al lodo base, esto quiere decir que no se presentaron alteraciones en esta propiedad debido a que no se adicionaron aditivos que cumplan la función de densificante al fluido figura (33). Otra de las propiedades evaluadas fue la viscosidad (cp.), en la que se evidencio un aumento del 3,486 *cp* aproximadamente para las diferentes amplitudes manteniéndose en el rango de viscosidad para los fluidos con adición de nanosílice; según estudios realizados por Jain y col. (2015) y Ismail y col. (2016) los rangos de viscosidad plástica no sobrepasen los valores entre 18 y 29 (cp.) a 78 °F, para así lograr evitar pérdidas de presión por fricción y mantener una buena circulación del fluido figura (34).

Figura 34.

Comparación de densidad a 300K.



Figura 35.

Comparación de Viscosidad a 300K.



Por otra parte, para el fluido con adición de nanopartículas a una temperatura de 500k se evidencio un aumento en la densidad de $0,327 \ lb/gal$ respecto al lodo base, donde se evidencia que debido al cambio de temperatura dicha propiedad se encuentra por debajo de los rangos reportados mediante métodos experimentales figura (35); para la viscosidad (cp.), se evidencio

un aumento de 3,825 *cp* aproximadamente para las diferentes amplitudes manteniéndose en el rango de viscosidad para los fluidos de lodo base y con adición de nanosílice en comparación con los métodos experimentales. Figura (36).

Figura 36.

Comparación de densidad a 500K.



Figura 37.

Comparación de Viscosidad a 500K.



Basados en estudios previos Henry Elocgukwu, Raoof Gholami, Sharul Sham Dol en el paper denominado "An approach to improve the cuttings carrying capacity of nanosilica based muds", Stefanía Betancur Márquez en su provecto de investigación de la universidad Nacional de Colombia sede Medellín denominado "Mejoramiento de los fluidos de perforación usando nanopartículas funcionalizadas: reducción de las pérdidas de filtrado y del espesor de la retorta" y Katerin Maritza Prieto Rey con su proyecto de investigación "Evaluación de la viabilidad técnico- financiera de las nanopartículas de sílice como aditivo para el control del filtrado en el fluido de perforación base agua a nivel laboratorio", realizados mediante métodos experimentales se obtuvieron resultados favorables en la reducción del filtrado y la retorta para lodos de perforación base agua - montmorillonita con adición de nanopartículas de sílice, efecto que beneficia a la industria gracias a la reducción de costos en las operaciones de perforación; otra manera de reducir y beneficiar las operaciones es mediante predicciones analíticas que logran aproximaciones a los resultados obtenidos experimentalmente; es por ello que esta investigación se basó en simulaciones de dinámica molecular para conocer los efectos causados por las interacciones atómicas debido a la presencia de nanopartículas de sílice en lodos base agua – montmorillonita obteniendo resultados de propiedades especificas tales como viscosidad y densidad, para así por medio de ellas poder correlacionarlas en la reducción de problemas operacionales comunes específicamente en el filtrado y espesor de la torta.

Por medio de estas propiedades calculadas a diferentes temperaturas podemos evidenciar y concluir que para el filtrado:

A medida que pasa el tiempo la tasa de filtración y la velocidad de crecimiento de la torta, disminuyen de manera gradual, cuando la presión y la viscosidad son relativamente constantes; basados en la ley de Darcy como se observa en la figura (37).

Figura 38.



Relación entre la pérdida de filtrado y la raíz cuadrada del tiempo.

Al realizar un incremento en la temperatura se evidencio una disminución en la viscosidad tabla (11); efecto que causa un aumento en las pérdidas de filtrado teniendo consecuencias desfavorables en la aplicabilidad de la nanopartícula a los fluidos de perforación.

Por otra parte, el estudio de las nanopartículas de sílice para la formulación de lodos de perforación se ha venido estudiando durante los últimos años, donde se ha notado la mejora en el filtrado de lodo (Amanullah y Al-Tahini, 2009; Amanullah et al., 2011; Srivatsa y Ziaja, 2012; Zakaria et al., 2012; Sadeghalvaad y Sabbaghi, 2014; Barry y col., 2015; Ismail et al., 2016); una muestra de ello son los resultados de las pruebas experimentales donde se realizó la medición del potencial Z de la nanosílice y la bentonita que evalúa la carga superficial de la solución acuosa y que mide la estabilidad coloidal de las partículas dispersas; indicando que la superficie de la nanosílice y bentonita están cargadas negativamente lo que producen cambios desfavorables en la reología del lodo cuando se agrega nanosílice; esto se puede atribuir a la

Nota: Adaptado de GUARACHI FREDY. Guías de laboratorio. UMSA. Determinación del filtrado y el revoque.2013.

repulsión electrostática entre la partícula de bentonita y la nanosílice que ha dado como resultado una estructura de partícula desfloculada figura (39). Un comportamiento similar fue observado por Vryzas y col. (2015) y Mahmoud y col. (2016) incluso a una temperatura más alta.

Para el filtrado del lodo las características generales dependen de la cantidad de materiales coloidales incluidos y de su naturaleza (Kelessidis y col., 2006). Se pudo observar que para un lodo base con adición de nanosílice tuvo un aumento en el volumen filtrado esto puede estar relacionado con la desfloculación de las partículas debido a la repulsión electrostática entre la nanosílice y la bentonita en una interacción cara a cara, lo que podría provocar una falla en la construcción de una conexión.

Figura 39.

Repulsión entre Partículas de Bentonita y Nanosílice.



Nota: Adaptado de Henry Elocgukwu, Raoof Gholami, Sharul Sham Dol. An approach to improve the cuttings carrying capacity of nanosilica based muds (2017).

8. Conclusiones

Se puede deducir que a partir de los datos arrojados en la simulación para propiedades de densidad y viscosidad se encuentran dentro del rango de los datos reportados experimentalmente, supuestos que sirven como base para asociar el comportamiento del control de filtrado para un fluido base con adición de nanopartícula de sílice, obteniendo resultados negativos para el control de filtrado debido a la degradación de las partículas a altas temperaturas lo que conlleva a la desfloculación de las partículas sílice - bentonita.

La simulación puede ser una antesala o ir de la mano con las pruebas de laboratorio con el fin de realizar un estudio detallado del sistema a analizar, ya que gracias a la simulación se puede corroborar y reemplazar algunos datos experimentales en escalas de tiempo mucho menores haciendo de ella una herramienta mucho más efectiva en diferentes aspectos.

Las herramientas brindadas por la tecnología pueden predecir con anticipación y así resolver con mayor facilidad y rapidez problemas asociados a daños de formación, perdidas de filtrado e hinchamiento de arcillas en lodos base agua, logrando la reducción de incertidumbres, riesgos y optimizando recursos para beneficio de la industria.

9. Recomendaciones

Realizar la simulación bajo herramientas tecnológicas más avanzadas, permitiendo que la corrida sea mucho más eficiente y en tiempos menores.

Probar con mayor cantidad de átomos variando diferentes parámetros en las interacciones de sílice, bentonita y agua, para así observar con claridad los efectos causados durante el proceso y poder obtener resultados más precisos en la simulación.

Realizar estudios de dinámica molecular con diferentes tipos de nanopartículas con aplicaciones para lodos base aceite.

Referencias Bibliográficas

- Abdo J. and Haneef M. D (2010). "Nanoparticles: Promising Solutions to Overcome Stern Drilling Problems", *Mechanical and Industrial Engineering Department*. NSTI-Nanotech, vol. 3, pp. 635–638.
- Abraham, W (1933). Null. "The Functions of Mud Fluids Used in Rotary Drilling". *1st World Petroleum Congress*. World Petroleum Congress.
- Adams N; Charrier T (1985). Drilling engineering: a complete well planning approach. Pennwell Corp.
- Alder, B; Wainwright, T (1957). Phase transition for a hard sphere system. J. Chem. Phys. 27, 1208–1209.
- Alvi N, et al. (2016). Peristalsis of nonconstant viscosity Jeffrey fluid with nanoparticles. Results Phys;6:1109–25.
- Allen, M; Tildesley, D; (2017). Computer Simulation of Liquids. Oxford university press.
- Ariza León E; Cely C; Gómez Cañón J. D (2013). Factibilidad del uso del almidón de achira como agente controlador de filtrado en lodos de perforación base agua. Revista *ION*, vol. 26, no 1, pp 63-71.
- Ayatollahi, S; Zerafat, M; (2012). Nanotechnology-assisted EOR techniques: *new solutions to old challenges*. In: SPE International Oilfield Nanotechnology Conference and Exhibition. Society of Petroleum Engineers.

Baca, G (2000). Ingeniería Económica. Bogotá: Fondo Educativo Panamericana. 46 p

Baroid (1999). Manual de fluidos de perforación. 70 p

Barron Andrew; Potter David; Resasco Daniel (2011). *Objetos Grandes en Paquetes Pequeños*. En Oilfield Review, vol. 22, no. 3; 50 p

Baker Hugues INTEQ (2006). Drilling fluids Reference Manual, pp, 8-12.

Baker, R (1998). A Primer of Offshore Operations. Petroleum Extension Service, Division of Continuing Education, University of. Berendsen, H.J.C., Grigera, J.R., Straatsma, T.P., 1987. The missing term in effective pair potentials. J. Phys. Chem. 91, 6269–6271

Baroid-Halliburton Company (2000). Manual de fluidos. pp. 13-12

- Barry MM, et al. (2015). Fluid filtration and rheological properties of nanoparticle additive and intercalated clay hybrid bentonite drilling fluids. J Petrol Sci Eng;127:338–46.
- Betancur E; Alzate G y Cortés F (2014). Mejoramiento de los fluidos de perforación usando nanopartículas funcionalizadas: educción de las pérdidas de filtrado y del espesor de la retorta. En: Boletín Ciencias de la Tierra, Nro. 35, ISSN 0120-3630. ; 40 p.
- Best, R; Zhu, X; Shim, J; Lopes, P; Mittal, J; Feig, M; MacKerell Jr; A (2012). Optimization of the additive CHARMM all-atom protein forcé field targeting improved sampling of the backbone φ, ψ and side-chain χ1 and
- Bizmark N, Ioannidis MA (2015). Effects of ionic strength on the coloidal stability and interfacial assembly of hydrophobic ethyl cellulos nanoparticles. Langmuir;31(34):9282–9.
- Bourgoyne, A.T., et al. (1986). Applied drilling engineering.
- Bourgoyne Jr, T, et al., Applied drilling engineering, Vol. 2. 1991. Richardson, Texas: SPE Textbook Series. Society of Petroleum Engineers.
- Brunauer, S; Emmett, P.H; Teller E (1938). Adsorption of gases in multi-molecular layers. J. Am. Chem. Soc. vol. 60. pp 309–319.
- Caenn R, Darley HC, Gray GR (2011). Composition and properties of drilling and completion fluids. Gulf professional publishing.

- Chen H, Ding Y (2009). Heat transfer and rheological behaviour of nanofluids–a review. A. Parizad et al. Results in Physics 9 (2018) 1656–1665 1664 Advances in transport phenomena. Springer. p. 135–77.
- Chen H, et al. (2008). Heat transfer and flow behaviour of aqueous suspensions of titanate nanotubes (nanofluids). Powder Technol;183(1):63–72.
- Chenevert M, Osisanya S (1989). Shale/mud inhibition defined with rig-site methods. SPE Drilling Eng;4(03):261–8.
- Dolz M, et al. (2007). Flow and thixotropy of non-contaminating oil drilling fluids formulated with bentonite and sodium carboxymethyl cellulose. J Petrol Sci Eng;57(3):294–302.
- Esmaeeli Azadgoleh J, et al. (2014). Stability of silica nanoparticle dispersion in brine solution: an experimental study. Iran J Oil Gas Sci Technol;3(4):26–40.
- Friedheim JE, et al. (2012). Nanotechnology for oilfield applications-hype or reality? SPE international oilfield nanotechnology conference and exhibition. Society of Petroleum Engineers.
- Franco, C; Nassar N; Ruiz, M., Pereira P & Cortés F. (2013). Nanoparticles for inhibition of asphaltenes damage: adsorption study and displacement test on porous media. Energy & Fuels, vol. 27, no 6, pp. 2899-2907.
- Fink J (2015). "Water-based Chemicals and Technology for Drilling, Completion, and Workover Fluids". Gulf Professional Publishing.
- Forero A (2016). "Evaluación de Diferentes Sistemas de Lodos de Perforación para Disminuir el Daño de Formación en un Campo de Crudo Pesado". Diss. Universidad Nacional de Colombia-Sede Medellín.

- Gherab K, et al. (2017). Aluminium nanoparticles size effect on the optical and structural properties of ZnO nanostructures synthesized by spin-coating technique. Results Phys; 7:1190–7.
- Horngren, C (200). Introducción a la contabilidad financiera. Ed. Pearson Education.151 p
- Hoelscher K; Guido de Stefano, Meghan R; Young S (2012). Application of nanotechnology in drilling fluids. In SPE International Oilfield Nanotechnology Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers, SPE 157031.
- Husein M; Mohammad F; Zacaria & Hareland G (2012). Novel nanoparticles-based drilling fluids with improved characteristics. In SPE International Oilfield Nanotechnology Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers, SPE 156992.
- Huda AB, et al. (2017). Dynamics of variable-viscosity nanofluid flow with heat transfer in a flexible vertical tube under propagating waves. Results Phys;7:413–25.Usui S (1998). DLVO theory of colloid stability. Surfactant Sci Ser:101–18.
- Javeri M; Zishaan W; Haindade & Chaitanya B. Jere (2011). Mitigating loss circulation and differential sticking problems using silicon nanoparticles. In SPE/IADC Middle East Drilling Technology Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers, SPE/IADC 145840.
- Javeri M; Zishaan W; Chaitanya B (2011). Mitigating loss circulation and differential sticking problems using silicon nanoparticles. En SPE/IADC Middle East Drilling Technology Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers. SPE/IADC 145840.10 pp.
- Jensen, B., et al. (2004). "Application of Water Based Drilling Fluid-Total Fluid Management". IADC/SPE Drilling Conference. Society of Petroleum Engineers.

- Javeri M; Zishaan H, and Chaitanya J (2011). "Mitigating Loss Circulation and Differential Sticking Problems Using Silicon Nanoparticles." SPE/IADC Middle East Drilling Technology Conference and Exhibition. Society of Petroleum Engineers.
- Jung, Youngsoo, et al. (2011). "Effect of Nanoparticle-additives on the Rheological Properties of Clay-based Fluids at High Temperature and High Pressure". AADE National Technical Conference and Exhibition, Texas, USA.
- Kestin J, Khalifa HE, Correia RJ (1981). Tables of the dynamic and kinematic viscosity of aqueous KCl solutions in the temperature range 25–150 C and the pressure range 0.1–35 MPa. J Phys Chem Ref Data;10(1):57–70
- Lang K; Burnett N; Allan D and Fergusson, A (2005). "The Good Practices in HS&E Management of Contractors". SPE Asia Pacific Health, Safety and Environment Conference and Exhibition. Society of Petroleum Engineers.
- Lacewell J, and David B (2000). "Correlating Good Well Design, Drilling and Cleanup Practices with High Well Productivity". SPE/CIM International Conference on Horizontal Well Technology. Society of Petroleum Engineers.
- Mahmoud O, et al. (2017). Characterization of filter cake generated by nanoparticle-based drilling fluid for HP/HT applications. SPE international conference on oilfield chemistry. Society of Petroleum Engineers.
- Needaa A-M, et al. (2016). Controlling bentonite-based drilling mud properties using sepiolite nanoparticles. Petrol Explor Dev;43(4):717–23.
- Parizad A, Shahbazi K (2016). Experimental investigation of the effects of SnO2 nanoparticles and KCl salt on a water base drilling fluid properties. Can J Chem Eng.

- Price K; Young S; Friedheim J; Guido S (2012). Nanotechnology Application in Drilling Fluids.
 En: SPE International Oilfield Nanotechnology Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers, SPE 157031. 5 pp
- Sadeghalvaad M, Sabbaghi S (2015). The effect of the TiO2/polyacrylamide nanocomposite on water-based drilling fluid properties. Powder Technol; 272:113–9.
- Salih A, Bilgesu H (2017). Investigation of rheological and filtration properties of waterbased drilling fluids using various anionic nanoparticles. SPE western regional meeting. Society of Petroleum Engineers.
- Schremp F, Johnson V. (1952). Drilling fluid filter loss at high temperatures and pressures. J Petrol Technol. 4(06):157–62.
- Sharma AK, Tiwari AK, Dixit AR (2016). Rheological behaviour of nanofluids: a review. Renewable Sustainable Energy Rev; 53:779–91.
- Sharma AK, et al. (2017). Novel uses of alumina-MoS 2 hybrid nanoparticle enriched cutting fluid in hard turning of AISI 304 steel. J Manuf Process; 30:467–82.
- Sharma AK, et al. (2018). Novel uses of alumina/graphene hybrid nanoparticle additives for improved tribological properties of lubricant in turnin operation. Tribol Int; 119:99–111.
- Sharma AK, Tiwari AK, Dixit AR (2015). Mechanism of nanoparticles functioning and effects in machining processes: a review. Mater Today: Proc ;2(4–5):3539–44.
- Sensoy T; Chenevert M. & Mukul M. (2014). Minimizing water invasion in shale using nanoparticles. En: SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers, SPE 124429. 13 pp.
- Saboori, R., et al. (2012). "Decreasing of Water Loss and Mud Cake Thickness by CMC Nanoparticles in Mud Drilling". International Journal of Nano Dimension 3.2: 101- 104.

Vryzas Z, Kelessidis VC (2017). Nano-based drilling fluids: a review. Energies;10(4):540.

- William JKM, et al. (2014). Effect of CuO and ZnO nanofluids in xanthan gum on thermal, electrical and high pressure rheology of water-based drillin fluids. J Petrol Sci Eng; 117:15–27.
- Zakaria M, Maen H y Geir H (2012). "Novel Nanoparticle-based Drilling Fluid with Improved Characteristics." SPE International Oilfield Nanotechnology Conference and Exhibition. Society of Petroleum Engineers.

Apéndices

Apéndice A. Topología de los modelos de lodo base.

```
LAMMPS data file. CGCMM style.
 atom style full generated by VMD/TopoTools v1.8
 on Sun Aug 29 08:40:08 -05 2021
 1284 atoms
 808 bonds
 400 angles
 0 dihedrals
 0 impropers
 10 atom types
 2 bond types
 1 angle types
 0 dihedral types
0 improper types
-0.228000 4.947000 xlo xhi
-0.069000 8.827000 ylo yhi
 -0.470329 120.871331 zlo zhi
Masses
1 26.981538 #Alo
2 1.0079 #Ho
3 1.0079 #Hw
4 24.3050 #Mgo
5 22.98977 #Na
6 15.9994 #Ob
7 15.9994 #Ohs
8 15.9994 #Obos
9 15.9994 #Ow
10 28.0855 #Si
Pair Coeffs
1 1.3298e-6 4.2712 #Alo
2 0.0 0.0 #Ho
3
  0.0 0.0 #Hw
4 9.0298e-7 5.264 #Mgo
5 0.1301 2.3500 #Na
6 0.1554 3.1655 #Ob
  0.1554 3.1655 #Ohs
7
8 0.1554 3.1655 #Obos
9 0.1554 3.1655 #Ow
10 1.8405e-6 3.3020 #Si
Bond Coeffs
1 554.1349 1.000 #oh-ho
2 554.1349 1.000 #ow-hw
Angle Coeffs
1 45.7696 109.47 #Hw-Ow-Hw
```

Atoms # full

1 1 10 0.000000 4.309000 1.450000 0.589000 # Si 2 1 6 0.000000 0.568000 2.010000 0.012000 # Ob 3 1 8 0.000000 4.316000 1.913000 2.160000 # Oo 4 1 10 0.000000 1.722000 5.898000 0.589000 # Si 5 1 6 0.000000 3.156000 6.458000 0.012000 # Ob 6 1 8 0.000000 1.728000 6.361000 2.160000 # Oo 7 1 10 0.000000 1.977000 1.450000 5.277000 # Si 8 1 6 0.000000 0.544000 2.010000 5.854000 # Ob 9 1 8 0.000000 1.971000 1.913000 3.706000 # Oo 10 1 10 0.000000 4.565000 5.898000 5.277000 # Si 11 1 6 0.000000 3.131000 6.458000 5.854000 # Ob 12 1 8 0.000000 4.559000 6.361000 3.706000 # Oo 13 1 10 0.000000 1.977000 7.446000 5.277000 # Si 14 1 6 0.000000 0.544000 6.886000 5.854000 # Ob 15 1 8 0.000000 1.971000 6.983000 3.706000 # Oo 16 1 10 0.000000 4.565000 2.998000 5.277000 # Si 17 1 6 0.000000 3.131000 2.438000 5.854000 # Ob 18 1 8 0.000000 4.559000 2.535000 3.706000 # Oo 19 1 10 0.000000 4.309000 7.446000 0.589000 # Si 20 1 6 0.000000 0.568000 6.886000 0.012000 # Ob 21 1 8 0.000000 4.316000 6.983000 2.160000 # Oo 22 1 10 0.000000 1.722000 2.998000 0.589000 # Si 23 1 6 0.000000 3.156000 2.438000 0.012000 # Ob 24 1 8 0.000000 1.728000 2.535000 2.160000 # Oo 25 1 5 0.000000 -0.381000 4.487000 67.625000 # Na 26 1 5 0.000000 2.206000 0.039000 67.625000 # Na 27 1 1 0.000000 3.143000 3.416000 2.933000 # Al 28 1 1 0.000000 0.556000 7.864000 2.933000 # Al 29 1 4 0.000000 3.143000 5.480000 2.933000 # Mg 30 1 4 0.000000 0.556000 1.032000 2.933000 # Mg 31 1 6 0.000000 4.772000 0.000000 0.000000 # Ob 32 1 7 0.000000 1.450000 0.000000 1.546000 # Oh 33 1 6 0.000000 2.185000 4.448000 0.000000 # Ob 34 1 7 0.000000 4.037000 4.448000 1.546000 # Oh

69 1 6 0.000000 2.295000 0.039000 58.555000 # Ob 70 1 7 0.000000 4.148000 0.039000 60.102001 # Oh 71 1 6 0.000000 4.883000 4.487000 58.555000 # Ob 72 1 7 0.000000 1.560000 4.487000 60.102001 # Oh 73 1 6 0.000000 4.212000 0.039000 64.421997 # Ob 74 1 7 0.000000 2.360000 0.039000 62.875000 # Oh 75 1 6 0.000000 1.625000 4.487000 64.421997 # Ob 76 1 7 0.000000 -0.228000 4.487000 62.875000 # Oh 77 1 2 0.000000 4.037000 4.448000 0.546000 # Ho 78 1 2 0.000000 2.249000 4.448000 5.320000 # Ho 79 1 2 0.000000 3.837000 0.000000 4.320000 # Ho 80 1 2 0.000000 2.450000 0.000000 1.546000 # Ho 81 1 2 0.000000 -0.228000 4.487000 61.875000 # Ho 82 1 2 0.000000 1.560000 4.487000 59.102001 # Ho 83 1 2 0.000000 3.148000 0.039000 60.102001 # Ho 84 1 2 0.000000 1.360000 0.039000 62.875000 # Ho 85 1 9 0.000000 3.890000 8.545000 12.223000 # Ow 86 1 3 0.000000 3.769000 8.769000 11.143000 # Hw 87 1 3 0.000000 2.899000 8.312000 12.666000 # Hw 88 1 9 0.000000 2.584000 6.411000 107.666000 # Ow 89 1 3 0.000000 3.589000 6.864000 107.796997 # Hw 90 1 3 0.000000 2.640000 5.322000 107.870003 # Hw 91 1 9 0.000000 3.112000 5.641000 29.009001 # Ow 92 1 3 0.000000 2.311000 5.057000 29.507999 # Hw 93 1 3 0.000000 3.481000 5.081000 28.124001 # Hw 94 1 9 0.000000 2.710000 1.516000 96.719002 # Ow 95 1 3 0.000000 3.111000 0.482000 96.662003 # Hw 96 1 3 0.000000 2.634000 1.825000 97.781998 # Hw 97 1 9 0.000000 0.073000 2.216000 55.158001 # Ow 98 1 3 0.000000 -0.100000 3.259000 54.818001 # Hw 99 1 3 0.000000 -0.364000 2.078000 56.167999 # Hw 100 1 9 0.000000 2.452000 2.698000 69.245003 # Ow

-				
ы.	~	-	-	-
			• •	-
_	-		-	_

			Ang:	les			
1	1	32 80					
2	1	34 77	1	1	86	85	87
3	1	36 79	2	1	89	88	90
4	1	38 78	3	1	92	91	93
5	1	70 83	4	1	95	94	96
6	1	72 82	5	1	98	97	99
7	1	74 84	6	1	101	100	102
8	1	76 81	7	1	104	103	105
9	2	85 86	8	1	107	106	108
10	2	88 89	9	1	110	109	111
11	2	91 92	10	1	113	112	114
12	2	94 95	11	1	116	115	117
13	2	97 98	12	1	119	118	120
14	2	100 101	13	1	122	121	123
15	2	103 104	14	1	125	124	126
16	2	106 107	15	1	128	127	129
17	2	109 110	16	1	131	130	132
18	2	112 113	17	1	134	133	135
19	2	115 116	18	1	137	136	138
20	2	118 119	19	1	140	139	141
21	2	121 122	20	1	143	142	144
22	2	124 125	21	1	146	145	147
23	2	127 128	22	1	149	148	150
24	2	130 131	23	1	152	151	153
25	2	133 134	24	1	155	154	156
26	2	136 137	25	1	158	157	159
27	2	139 140	26	1	161	160	162
28	2	142 143	27	1	164	163	165
29	2	145 146	28	1	167	166	168
30	2	148 149	29	1	170	169	171
31	2	151 152	30	1	173	172	174
32	2	154 155	31	1	176	175	177
33	2	157 158	32	1	179	178	180
34	2	160 161					

LAMMPS data file. CGCMM style. atom_style full generated by VMD/TopoTools v1.8 on Sun Aug 29 08:39:45 -05 2021 1584 atoms 1008 bonds 500 angles 0 dihedrals 0 impropers 10 atom types 2 bond types 1 angle types 0 dihedral types 0 improper types -0.055000 5.120000 xlo xhi -0.054000 8.842000 ylo yhi 0.073670 121.415330 zlo zhi Masses 1 26.981538 #Alo 2 1.0079 #Ho 3 1.0079 #Hw 4 24.3050 #Mgo 5 22.98977 #Na 6 15.9994 #Ob 7 15.9994 #Ohs 8 15.9994 #Obos 9 15.9994 #Ow 10 28.0855 #Si Pair Coeffs 1 1.3298e-6 4.2712 #Alo 2 0.0 0.0 #Ho 3 0.0 0.0 #Hw 4 9.0298e-7 5.264 #Mgo 5 0.1301 2.3500 #Na 6 0.1554 3.1655 #Ob 7 0.1554 3.1655 #Ohs 8 0.1554 3.1655 #Obos 9 0.1554 3.1655 #Ow 10 1.8405e-6 3.3020 #Si Bond Coeffs 1 554.1349 1.000 #oh-ho 2 554.1349 1.000 #ow-hw

Angle Coeffs

1 45.7696 109.47 #Hw-Ow-Hw

Atoms # full

1 1 10 0.000000 4.309000 1.450000 0.589000 # Si 2 1 6 0.000000 0.568000 2.010000 0.012000 # Ob 3 1 8 0.000000 4.316000 1.913000 2.160000 # Oo 4 1 10 0.000000 1.722000 5.898000 0.589000 # Si 5 1 6 0.000000 3.156000 6.458000 0.012000 # Ob 6 1 8 0.000000 1.728000 6.361000 2.160000 # Oo 7 1 10 0.000000 1.977000 1.450000 5.277000 # Si 8 1 6 0.000000 0.544000 2.010000 5.854000 # Ob 9 1 8 0.000000 1.971000 1.913000 3.706000 # Oo 10 1 10 0.000000 4.565000 5.898000 5.277000 # Si 11 1 6 0.000000 3.131000 6.458000 5.854000 # Ob 12 1 8 0.000000 4.559000 6.361000 3.706000 # Oo 13 1 10 0.000000 1.977000 7.446000 5.277000 # Si 14 1 6 0.000000 0.544000 6.886000 5.854000 # Ob 15 1 8 0.000000 1.971000 6.983000 3.706000 # Oo 16 1 10 0.000000 4.565000 2.998000 5.277000 # Si 17 1 6 0.000000 3.131000 2.438000 5.854000 # Ob 18 1 8 0.000000 4.559000 2.535000 3.706000 # Oo 19 1 10 0.000000 4.309000 7.446000 0.589000 # Si 20 1 6 0.000000 0.568000 6.886000 0.012000 # Ob 21 1 8 0.000000 4.316000 6.983000 2.160000 # Oo 22 1 10 0.000000 1.722000 2.998000 0.589000 # Si 23 1 6 0.000000 3.156000 2.438000 0.012000 # Ob 24 1 8 0.000000 1.728000 2.535000 2.160000 # Oo 25 1 5 0.000000 -0.381000 4.487000 67.625000 # Na 26 1 5 0.000000 2.206000 0.039000 67.625000 # Na 27 1 1 0.000000 3.143000 3.416000 2.933000 # Al 28 1 1 0.000000 0.556000 7.864000 2.933000 # Al 29 1 4 0.000000 3.143000 5.480000 2.933000 # Mg 30 1 4 0.000000 0.556000 1.032000 2.933000 # Mg 31 1 6 0.000000 4.772000 0.000000 0.000000 # Ob 32 1 7 0.000000 1.450000 0.000000 1.546000 # Oh 33 1 6 0.000000 2.185000 4.448000 0.000000 # Ob 34 1 7 0.000000 4.037000 4.448000 1.546000 # Oh 35 1 6 0.000000 1.514000 0.000000 5.866000 # Ob 36 1 7 0.000000 4.837000 0.000000 4.320000 # Oh 37 1 6 0.000000 4.102000 4.448000 5.866000 # Ob 38 1 7 0.000000 2.249000 4.448000 4.320000 # Oh 39 1 10 0.000000 1.833000 1.489000 59.145000 # Si

260	1	3	0.000000	1.636000	5.585000	55.235001 # Hw
261	1	3	0.000000	0.288000	4.374000	55.250999 # Hw
262	1	9	0.000000	1.340000	4.019000	22.802999 # Ow
263	1	3	0.000000	1.086000	5.054000	22.490999 # Hw
264	1	3	0.000000	2.352000	4.009000	23.259001 # Hw
265	1	9	0.000000	0.480000	1.668000	85.170998 # Ow
266	1	3	0.000000	-0.290000	2.465000	0 85.103996 # Hw
267	1	3	0.000000	-0.018000	0.683000	0 85.290001 # Hw
268	1	9	0.000000	4.344000	8.156000	88.651001 # Ow
269	1	3	0.000000	5.289000	8.737000	88.623001 # Hw
270	1	3	0.000000	3.761000	8.442000	89.552002 # Hw
271	1	9	0.000000	0.602000	8.428000	37.612000 # Ow
272	1	3	0.000000	0.617000	9.537000	37.634998 # Hw
273	1	3	0.000000	-0.013000	8.08400	0 36.754002 # Hw
274	1	9	0.000000	4.015000	4.423000	21.049999 # Ow
275	1	3	0.000000	4.551000	3.494000	21.340000 # Hw
276	1	3	0.000000	4.059000	5.151000	21.886999 # Hw
277	1	9	0.000000	0.779000	5.878000	119.089996 # Ow
278	1	3	0.000000	1.546000	6.348000	118.440002 # Hw
279	1	3	0.000000	0.567000	4.850000	118.728996 # Hw
280	1	9	0.000000	2.553000	3.196000	36.148998 # Ow
281	1	3	0.000000	2.863000	2.146000	36.327000 # Hw
282	1	3	0.000000	3.453000	3.844000	36.098999 # Hw
283	1	9	0.000000	4.645000	4.368000	8.605000 # Ow
284	1	3	0.000000	4.830000	3.426000	9.162000 # Hw
285	1	3	0.000000	4.122000	5.091000	9.266000 # Hw
286	1	9	0.000000	5.019000	1.050000	101.817001 # Ow
287	1	3	0.000000	6.122000	1.046000	101.938004 # Hw
288	1	3	0.000000	4.683000	2.061000	101.507004 # Hw
289	1	9	0.000000	0.637000	5.548000	104.417000 # Ow
290	1	3	0.000000	0.562000	6.380000	103.685997 # Hw
291	1	3	0.000000	1.115000	5.916000	105.348999 # Hw
292	1	9	0.000000	3.117000	3.175000	28.164000 # Ow
293	1	3	0.000000	2.103000	3.475000	28.500999 # Hw
294	1	3	0.000000	3.462000	2.303000	28.757000 # Hw
295	1	9	0.000000	1.485000	7.630000	97.017998 # Ow
296	1	3	0.000000	0.982000	8.551000	96.654999 # Hw
297	1	3	0.000000	1.191000	6.771000	96.378998 # Hw
298	1	9	0.000000	1.442000	0.593000	93.752998 # Ow
299	1	3	0.000000	1.525000	0.581000	94.860001 # Hw
300	1	3	0.000000	2.256000	-0.021000	0 93.315002 # Hw
301	1	9	0.000000	0.980000	1.136000	66.813004 # Ow
302	1	3	0.000000	1.888000	1.769000	66.728996 # Hw
303	1	3	0.000000	0.465000	1.093000	65.831001 # Hw
304	1	9	0.000000	1.925000	2.963000	80.680000 # Ow
305	1	3	0.000000	2.566000	2.534000	79.882004 # Hw
306	1	3	0.000000	2.516000	3,685000	81.281998 # Hw
	-	-				

14	2	100	101	Angles				
15	2	103	104	Angles				
16	2	106	107	1	1	96	0E	07
17	2	109	110	2	1	00	00	0/
18	2	112	113	2	1	03	00	90
19	2	115	116	4	1	92	91	95
20	2	118	119	4 E	1	90	94	90
21	2	121	122	5	1	90	100	102
22	2	124	125	7	1	101	100	102
23	2	127	128	6	1	104	105	105
24	2	130	131	0	1	110	100	111
25	2	133	134	10	1	110	109	111
26	2	136	137	11	1	115	112	114
27	2	139	140	12	1	110	110	120
28	2	142	143	12	1	119	121	120
29	2	145	146	10	1	122	121	125
30	2	148	149	14	1	125	124	120
31	2	151	152	15	1	120	127	129
32	2	154	155	10	1	124	133	132
33	2	157	158	10	1	104	135	100
34	2	160	161	10	1	10/	130	100
35	2	163	164	19	1	140	139	141
36	2	166	167	20	1	145	142	144
37	2	169	170	21	1	140	145	147
38	2	172	173	22	1	149	148	150
39	2	175	176	20	1	152	151	155
40	2	178	179	24	1	155	154	150
41	2	181	182	25	1	158	157	159
42	2	184	185	20	1	101	160	162
43	2	187	188	27	1	164	105	100
44	2	190	191	20	1	10/	100	100
45	2	193	194	29	1	170	169	1/1
46	2	196	197	30	1	1/3	172	174
47	2	199	200	51	1	170	175	1//
48	2	202	203	32	1	1/9	1/8	180
49	2	205	206	55	1	102	181	185
50	2	208	209	34	1	105	184	180
51	2	211	212	35	1	188	187	189
52	2	214	215	36	1	191	190	192
53	2	217	218	37	1	194	193	195
54	2	220	221	38	1	197	196	198
55	2	223	224	39	1	200	199	201
56	2	226	227	40	1	203	202	204
57	2	229	230	41	1	206	205	207
58	2	232	233	42	1	209	208	210
59	2	235	236	43	1	212	211	213
60	2	238	239	44	1	215	214	216
	-							

```
LAMMPS data file. CGCMM style.
atom style full generated by VMD/TopoTools v1.8
on Sun Aug 29 09:26:09 -05 2021
1884 atoms
1208 bonds
 600 angles
 0 dihedrals
 0 impropers
 10 atom types
 2 bond types
 1 angle types
 0 dihedral types
 0 improper types
 -0.071500 5.103500 xlo xhi
 0.078500 8.974500 ylo yhi
 -0.064830 121.276830 zlo zhi
Masses
1 26.981538 #Alo
2 1.0079 #Ho
3 1.0079 #Hw
4 24.3050 #Mgo
5 22.98977 #Na
6 15.9994 #Ob
7 15.9994 #Ohs
8 15.9994 #Obos
9 15.9994 #Ow
10 28.0855 #Si
Pair Coeffs
1 1.3298e-6 4.2712 #Alo
2 0.0 0.0 #Ho
3 0.0 0.0 #Hw
4 9.0298e-7 5.264 #Mgo
5 0.1301 2.3500 #Na
6 0.1554 3.1655 #Ob
7 0.1554 3.1655 #Ohs
8 0.1554 3.1655 #Obos
9 0.1554 3.1655 #Ow
10 1.8405e-6 3.3020 #Si
Bond Coeffs
1 554.1349 1.000 #oh-ho
2 554.1349 1.000 #ow-hw
Angle Coeffs
1 45.7696 109.47 #Hw-Ow-Hw
```

Atoms # full

2 1 6 0.000000 0.568000 2.010000 0.012000 # Ob 10 1 10 0.000000 4.565000 5.898000 5.277000 # Si 11 1 6 0.000000 3.131000 6.458000 5.854000 # Ob 12 1 8 0.000000 4.559000 6.361000 3.706000 # Oo 13 1 10 0.000000 1.977000 7.446000 5.277000 # Si 14 1 6 0.000000 0.544000 6.886000 5.854000 # Ob 15 1 8 0.000000 1.971000 6.983000 3.706000 # Oo 16 1 10 0.000000 4.565000 2.998000 5.277000 # Si 17 1 6 0.000000 3.131000 2.438000 5.854000 # Ob 18 1 8 0.000000 4.559000 2.535000 3.706000 # Oo 19 1 10 0.000000 4.309000 7.446000 0.589000 # Si 20 1 6 0.000000 0.568000 6.886000 0.012000 # Ob 21 1 8 0.000000 4.316000 6.983000 2.160000 # Oo 22 1 10 0.000000 1.722000 2.998000 0.589000 # Si 23 1 6 0.000000 3.156000 2.438000 0.012000 # Ob 30 1 4 0.000000 0.556000 1.032000 2.933000 # Mg 32 1 7 0.000000 1.450000 0.000000 1.546000 # Oh 96 1 3 0.000000 4.376000 6.007000 76.749001 # Hw 33 1 6 0.000000 2.185000 4.448000 0.000000 # Ob

1 1 10 0.000000 4.309000 1.450000 0.589000 # Si 66 1 1 0.000000 3.254000 7.903000 61.488998 # Al 67 1 4 0.000000 0.666000 5.519000 61.488998 # Mg

 3 1 8 0.000000 4.316000 1.913000 2.160000 # Oo
 68 1 4 0.000000 3.254000 1.071000 61.488998 # Mg

 4 1 10 0.000000 1.722000 5.898000 0.589000 # Si
 69 1 6 0.000000 2.295000 0.039000 58.555000 # Ob

 5 1 6 0.000000 3.156000 6.458000 0.012000 # Ob
 70 1 7 0.000000 4.148000 0.039000 60.102001 # Oh

 6 1 8 0.000000 1.728000 6.361000 2.160000 # Oo
 71 1 6 0.000000 4.883000 4.487000 58.555000 # Ob

 7 1 10 0.000000 1.977000 1.450000 5.277000 # Si
 72 1 7 0.000000 1.560000 4.487000 60.102001 # Oh

 8 1 6 0.000000 0.544000 2.010000 5.854000 # Ob
 73 1 6 0.000000 4.212000 0.039000 64.421997 # Ob

 9 1 8 0.000000 1.971000 1.913000 3.706000 # Oo
 74 1 7 0.000000 2.360000 0.039000 62.875000 # Oh

 75 1 6 0.000000 1.625000 4.487000 64.421997 # Ob 76 1 7 0.000000 -0.228000 4.487000 62.875000 # Oh 77 1 2 0.000000 4.037000 4.448000 0.546000 # Ho 78 1 2 0.000000 2.249000 4.448000 5.320000 # Ho 79 1 2 0.000000 3.837000 0.000000 4.320000 # Ho 80 1 2 0.000000 2.450000 0.000000 1.546000 # Ho 81 1 2 0.000000 -0.228000 4.487000 61.875000 # Ho 82 1 2 0.000000 1.560000 4.487000 59.102001 # Ho 83 1 2 0.000000 3.148000 0.039000 60.102001 # Ho 84 1 2 0.000000 1.360000 0.039000 62.875000 # Ho 85 1 9 0.000000 0.009000 0.892000 12.292000 # Ow 86 1 3 0.000000 0.602000 0.861000 11.354000 # Hw 87 1 3 0.000000 0.063000 1.911000 12.730000 # Hw 24 1 8 0.000000 1.728000 2.535000 2.160000 # Oo 88 1 9 0.000000 1.336000 3.032000 67.982002 # Ow 25 1 5 0.000000 -0.381000 4.487000 67.625000 # Na 89 1 3 0.000000 1.187000 2.588000 66.974998 # Hw 26 1 5 0.000000 2.206000 0.039000 67.625000 # Na 90 1 3 0.000000 0.756000 2.453000 68.731003 # Hw 27 1 1 0.000000 3.143000 3.416000 2.933000 # A1 91 1 9 0.000000 4.432000 3.098000 8.447000 # Ow

 28 1 1 0.000000 0.556000 7.864000 2.933000 # Al
 92 1 3 0.000000 5.494000 3.418000 8.386000 # Hw

 29 1 4 0.000000 3.143000 5.480000 2.933000 # Mg
 93 1 3 0.000000 4.093000 3.141000 9.503000 # Hw

 94 1 9 0.000000 5.011000 6.226000 77.633003 # Ow 31 1 6 0.000000 4.772000 0.000000 0.000000 # Ob 95 1 3 0.000000 5.804000 6.948000 77.349998 # Hw

Angl	.es				Bond	ls			
1	1	86	85	87			~~		_
2	1	89	88	90	1	1	32	8	
3	1	92	91	93	2	1	34	1	/
4	1	95	94	96	3	1	36	7	9
5	1	98	97	99	4	1	38	7	8
6	1	101	100	102	5	1	70	8	3
7	1	104	103	105	6	1	72	8:	2
8	1	107	106	108	7	1	74	8	4
9	1	110	109	111	8	1	76	8	1
10	1	113	112	114	9	2	85		86
11	1	116	115	117	10	2	88		89
12	1	119	118	120	11	2	91		92
13	1	122	121	123	12	2	94		95
14	1	125	124	126	13	2	97		98
15	1	128	127	129	14	2	100		101
16	1	131	130	132	15	2	103		104
17	1	134	133	135	16	2	106		107
18	1	137	136	138	17	2	100		110
19	1	140	139	141	10	2	112		112
20	1	143	142	144	10	2	110		110
21	1	146	145	147	19	2	113		110
22	1	149	148	150	20	2	118	i .	119
23	1	152	151	153	21	2	121		122
24	1	155	154	156	22	2	124	¢ .	125
25	1	158	157	159	23	2	127		128
26	1	161	160	162	24	2	130		131
27	1	164	163	165	25	2	133		134
28	1	167	166	168	26	2	136	i :	137
29	1	170	120	171	27	2	139) :	140
30	1	176	175	177	28	2	142	1	143
22	1	170	170	190	29	2	145	i :	146
32	1	192	101	193	30	2	148		149
34	1	185	184	186	31	2	151		152
35	1	188	187	189	32	2	154		155
00	-	200	207	100					

Apéndice B. Topología de la nanosílice.

```
Pair Coeffs
                            LAMMPS data file. CGCMM style.
                             atom style full generated by VMD/TopoTools v1.8
1 0.015 1.085#Hs
                              on Sat Jul 24 19:21:39 -05 2021
2 0.054 3.47#Ob
                              270 atoms
3 0.122 3.47#Os
                              296 bonds
4 0.093 4.15 #Si
                              434 angles
                              0 dihedrals
Bond Coeffs
                             0 impropers
                             4 atom types
1 285 1.68 #Si-Ob
                             2 bond types
2 495 0.945 #O-H
                             3 angle types
                             0 dihedral types
                             0 improper types
Angle Coeffs # harmonic -0.908638 19.091362 xlo xhi
                              -0.256990 19.743010 ylo yhi
1 50 115 # Si-O-H
                             0.413306 20.413306 zlo zhi
2 100 149.0 # Si-O-Si
3 100 109.5 # O-Si-O
                            Masses
                             1 1.0079
                             2 15.9994
                             3 15.9994
                             4 28.0855
```

Atoms # full

11	3	0.000000 3	3.642073 6.085764 4.532562 # Os
2 1	3	0.000000 8	5.456291 6.302988 2.635313 # Os
3 1	4	0.000000 8	5.092196 6.719878 4.162977 # Si
4 1	3	0.000000 1	7.392760 3.742424 5.280581 # Os
51	3	0.000000 3	3.190911 10.082716 3.472056 # Os
61	3	0.000000 3	3.207487 5.985759 7.169897 # Os
71	2	0.000000 (5.210127 6.139585 5.195587 # Ob
8 1	2	0.000000 8	5.053451 8.343814 4.281816 # Ob
91	3	0.000000 8	5.070027 4.246857 7.979657 # Os
10 1	4	0.000000	7.619043 5.351312 5.381558 # Si
11 1	4	0.000000	4.194398 9.663095 4.683193 # Si
12 1	4	0.000000	4.210974 5.566138 8.381034 # Si
13 1	13	0.000000	10.466487 6.033697 2.314497 # Os
14 1	13	0.000000	10.483060 1.937482 6.011668 # Os
15 1	1 2	0.000000	8.652270 5.816472 4.211746 # Ob
16 1	13	0.000000	8.668846 1.719515 7.909587 # Os
17 1	1 2	0.000000	3.314036 9.345766 6.016106 # Ob
18 1	1 2	0.000000	3.330609 5.249551 9.713277 # Ob
19 1	13	0.000000	1.499819 9.128541 7.913355 # Os
20 1	13	0.000000	1.516395 5.031584 11.611197 # Os
21 1	4	0.000000	10.102393 6.450587 3.842162 # Si
22 1	4	0.000000	10.118969 2.353630 7.540003 # Si
23 1	4	0.000000	2.949942 9.762656 7.543771 # Si
24 1	4	0.000000	2.966518 5.665699 11.241612 # Si
25 1	13	0.000000	12.402386 3.472581 4.959156 # Os
26 1	1 2	0.000000	5.233359 10.881607 4.962924 # Ob
27 1	1 2	0.000000	5.249935 6.784650 8.660765 # Ob
28 1	13	0.000000	5.266512 2.687693 12.358607 # Os
29 1	13	0.000000	8.200537 9.812873 3.150632 # Os
30 1	1 2	0.000000	8.217113 5.715916 6.848473 # Ob
31 1	13	0.000000	1.064662 9.027985 10.550082 # Os
32 1	2	0.000000	11.220323 5.870293 4.874771 # Ob
33 1	13	0.000000	11.236899 1.773336 8.572613 # Os
34 1	13	0.000000	10.063648 8.074523 3.961000 # Ob

194 1 3 0.000000 8.663088 12.836055 17.479797 # Os 195 1 4 0.000000 14.940480 14.940775 10.482333 # Si 196 1 4 0.000000 14.957056 10.843818 14.180174 # Si 197 1 4 0.000000 11.212674 13.941061 14.882308 # Si 198 1 2 0.000000 14.059548 14.622894 11.814638 # Ob 199 1 3 0.000000 14.076121 10.526680 15.511809 # Os 200 1 2 0.000000 12.245331 14.405670 13.711887 # Ob 201 1 4 0.000000 13.695453 15.039784 13.342303 # Si 202 1 3 0.000000 15.979441 16.159286 10.762064 # Os 203 1 3 0.000000 15.996017 12.062330 14.459906 # Os 204 1 3 0.000000 11.810744 14.305665 16.349222 # Os 205 1 3 0.000000 14.813384 14.459491 14.374912 # Os 206 1 3 0.000000 13.656709 16.663719 13.461141 # Os 207 1 1 0.000000 3.431993 6.246833 5.610437 # Hs 208 1 1 0.000000 4.699232 5.584523 2.257608 # Hs 209 1 1 0.000000 7.021325 3.358758 6.254142 # Hs 210 1 1 0.000000 2.170701 9.703408 3.689199 # Hs 211 1 1 0.000000 2.187277 5.606452 7.387040 # Hs 212 1 1 0.000000 4.414989 3.351413 8.023306 # Hs 213 1 1 0.000000 9.709428 5.315231 1.936792 # Hs 214 1 1 0.000000 9.725998 1.219759 5.633294 # Hs 215 1 1 0.000000 8.458766 1.880584 8.987463 # Hs 216 1 1 0.000000 1.289739 9.289610 8.991231 # Hs 217 1 1 0.000000 1.306315 5.192653 12.689072 # Hs 218 1 1 0.000000 12.030952 3.088915 5.932718 # Hs 219 1 1 0.000000 4.895077 2.304027 13.332169 # Hs 220 1 1 0.000000 7.180327 9.433565 3.367775 # Hs 221 1 1 0.000000 0.044452 8.648677 10.767225 # Hs 222 1 1 0.000000 10.732570 1.210805 9.385912 # Hs 223 1 1 0.000000 3.712814 13.669150 5.861200 # Hs 224 1 1 0.000000 2.506335 11.675358 8.654487 # Hs 225 1 1 0.000000 14.442294 6.205841 4.326149 # Hs

Angles	Bonds
1 1 3 1 207	1 1 1 207
2 1 3 2 209	2 1 1 207
2 1 3 2 200	2 1 1 3
3 1 10 4 209	3123
4 1 11 5 210	4 1 2 208
5 1 12 6 211	5137
6 1 12 9 212	6138
7 1 21 13 213	7 1 4 209
8 1 22 14 214	8 1 4 10
9 1 22 16 215	9 1 5 11
10 1 23 19 216	10 1 5 210
11 1 24 20 217	11 1 6 12
12 1 41 25 218	12 1 6 211
13 1 46 28 219	13 1 7 10
14 1 42 29 220	14 1 8 11
15 1 47 31 221	15 1 9 212
16 1 22 33 222	16 1 9 12
17 1 44 36 223	17 1 10 15
18 1 23 39 224	18 1 10 30
19 1 41 48 225	19 1 11 17
20 1 56 49 226	20 1 11 26
21 1 47 55 227	21 1 12 18
22 1 82 61 228	22 1 12 27
23 1 78 63 229	23 1 13 213
24 1 78 68 230	24 1 13 21
25 1 79 69 231	25 1 14 22
26 1 56 73 232	26 1 14 214
27 1 85 76 233	27 1 15 21
28 1 86 77 234	28 1 16 22
29 1 80 89 235	29 1 16 215
30 1 85 94 236	30 1 17 23
31 1 100 96 237	31 1 18 24
32 1 78 101 238	32 1 19 216
	33 1 19 23
	34 1 20 24

9 15.9994 #Ow 10 28.0855 #Si Apéndice C. Topología de lodo base con nanosílice.

LAMMPS data file. CGCMM style. atom_style full generated by VMD/TopoTools v1.8	Pair Coeffs
on Fri Sep 17 15:42:30 -05 2021	1 1.3298e-6 4.2712 #Alo
11553 atoms	2 0.0 0.0 #Ho
7270 bonds	3 0.0 0.0 #Hw
3599 angles	4 9.0298e-7 5.264 #Mgo
0 dihedrals	5 0.1301 2.3500 #Na
0 impropers	6 0.1554 3.1655 #Ob
10 atom types	7 0.1554 3.1655 #Ohs
2 bond types	8 0.1554 3.1655 #Obos
1 angle types	9 0.1554 3.1655 #Ow
0 dihedral types	10 1.8405e-6 3.3020 #Si
0 improper types	
0.058500 15.583500 xlo xhi	Bond Coeffs
-0.111500 26.576500 ylo yhi	
-0.154502 149.845498 zlo zhi	1 554.1349 1.000 #oh-ho
	2 554.1349 1.000 #ow-hw
Masses	
	Angle Coeffs
1 26.981538 #Alo	ingle occilo
2 1.0079 #Ho	1 45.7696 109.47 #Hw-Ow-Hw
3 1.0079 #Hw	1 101/050 10511/ #18 08 18
4 24.3050 #Mao	
5 22.98977 #Na	
6 15,9994 #0b	
7 15,9994 #Ohs	
8 15 9994 #Ohos	

Atoms # full

1 1 10 0.000000 4.309000 1.450000 0.589000 # Si	737 1 1 0.000000 11.109000 21.520000 73.858002 # Al
2 1 6 0.000000 0.568000 2.010000 0.012000 # Ob	738 1 1 0.000000 13.696000 25.968000 73.858002 # Al
3 1 8 0.000000 4.316000 1.913000 2.160000 # Oo	739 1 4 0.000000 11.109000 23.584000 73.858002 # Mg
4 1 10 0.000000 1.722000 5.898000 0.589000 # Si	740 1 4 0.000000 13.696000 19.136000 73.858002 # Mg
5 1 6 0.000000 3.156000 6.458000 0.012000 # Ob	741 1 6 0.000000 12.738000 18.104000 70.925003 # Ob
6 1 8 0.000000 1.728000 6.361000 2.160000 # Oo	742 1 7 0.000000 14.590000 18.104000 72.471001 # Oh
7 1 10 0.000000 1.977000 1.450000 5.277000 # Si	743 1 6 0.000000 15.325000 22.552000 70.925003 # Ob
8 1 6 0.000000 0.544000 2.010000 5.854000 # Ob	744 1 7 0.000000 12.003000 22.552000 72.471001 # Oh
9 1 8 0.000000 1.971000 1.913000 3.706000 # Oo	745 1 6 0.000000 14.655000 18.104000 76.791000 # Ob
10 1 10 0.000000 4.565000 5.898000 5.277000 # Si	746 1 7 0.000000 12.802000 18.104000 75.245003 # Oh
11 1 6 0.000000 3.131000 6.458000 5.854000 # Ob	747 1 6 0.000000 12.067000 22.552000 76.791000 # Ob
12 1 8 0.000000 4.559000 6.361000 3.706000 # Oo	748 1 7 0.000000 15.390000 22.552000 75.245003 # Oh
13 1 10 0.000000 1.977000 7.446000 5.277000 # Si	749 1 2 0.000000 10.800000 17.792000 1.546000 # Ho
14 1 6 0.000000 0.544000 6.886000 5.854000 # Ob	750 1 2 0.000000 14.387000 22.240000 2.546000 # Ho
15 1 8 0.000000 1.971000 6.983000 3.706000 # Oo	751 1 2 0.000000 14.187000 17.792000 4.320000 # Ho
16 1 10 0.000000 4.565000 2.998000 5.277000 # Si	752 1 2 0.000000 12.599000 22.240000 5.320000 # Ho
17 1 6 0.000000 3.131000 2.438000 5.854000 # Ob	753 1 2 0.000000 14.590000 19.104000 72.471001 # Ho
18 1 8 0.000000 4.559000 2.535000 3.706000 # Oo	754 1 2 0.000000 12.003000 22.552000 73.471001 # Ho
19 1 10 0.000000 4.309000 7.446000 0.589000 # Si	755 1 2 0.000000 13.802000 18.104000 75.245003 # Ho
20 1 6 0.000000 0.568000 6.886000 0.012000 # Ob	756 1 2 0.000000 15.390000 22.552000 74.245003 # Ho
21 1 8 0.000000 4.316000 6.983000 2.160000 # 00	757 1 9 0.000000 12.518000 8.075000 46.019001 # Ow
22 1 10 0.000000 1.722000 2.998000 0.589000 # Si	758 1 3 0.000000 11.449000 8.372000 46.068001 # Hw
23 1 6 0.000000 3.156000 2.438000 0.012000 # Ob	759 1 3 0.000000 12.881000 8.173000 44.974998 # Hw
24 1 8 0.000000 1.728000 2.535000 2.160000 # Oo	760 1 9 0.000000 1.670000 7.375000 146.658005 # Ow
25 1 5 0.000000 4.886000 4.760000 79.994003 # Na	761 1 3 0.000000 2.575000 6.996000 147.177994 # Hw
26 1 5 0.000000 2.298000 0.312000 79.994003 # Na	762 1 3 0.000000 1.931000 8.283000 146.076004 # Hw
27 1 1 0.000000 3.143000 3.416000 2.933000 # Al	763 1 9 0.000000 4.162000 14.824000 24.495001 # Ow
28 1 1 0.000000 0.556000 7.864000 2.933000 # Al	764 1 3 0.000000 3.095000 14.778000 24.795000 # Hw
29 1 4 0.000000 3.143000 5.480000 2.933000 # Mg	765 1 3 0.000000 4.424000 13.915000 23.915001 # Hw
30 1 4 0.000000 0.556000 1.032000 2.933000 # Mg	766 1 9 0.000000 13.290000 5.500000 105.669998 # Ow
31 1 6 0.000000 4.772000 0.000000 0.000000 # Ob	767 1 3 0.000000 13.124000 4.699000 104.918999 # Hw
32 1 7 0.000000 1.450000 0.000000 1.546000 # Oh	768 1 3 0.000000 12.422000 5.546000 106.360001 # Hw
33 1 6 0.000000 2.185000 4.448000 0.000000 # Ob	769 1 9 0.000000 9.241000 6.014000 16.309000 # Ow
34 1 7 0.000000 4.037000 4.448000 1.546000 # Oh	

Bonds					
	69	1 624 667			
1 1 32 77	70	1 626 668			
2 1 34 78	71	1 704 749			
3 1 36 79	72	1 706 750			
4 1 38 80	73	2 757 758			
5 1 70 81	74	2 760 761			
6 1 72 82	75	2 763 764			
7 1 74 83	76	2 766 767			
8 1 76 84	77	2 769 770			
9 1 324 334	78	2 772 773			
10 1 576 586	79	2 775 776			
11 1 578 587	80	2 778 779			
12 1 574 585	81	2 781 782			
13 1 660 670	82	2 784 785			
14 1 744 754	83	2 787 788			
15 1 664 672	84	2 790 791			
16 1 658 669	85	2 793 794			
17 1 748 756	86	2 796 797			
18 1 742 753	87	2 799 800			
19 1 746 755	88	2 802 803			
20 1 496 504	89	2 805 806			
21 1 662 671	90	2 808 809			
22 1 580 588	91	2 811 812			
23 1 492 502	92	2 814 815			
24 1 408 418	93	2 817 818			
25 1 328 336	94	2 820 821			
26 1 412 420	95	2 823 824			
27 1 322 333	96	2 826 827			
28 1 326 335	97	2 829 830			
29 1 490 501	98	2 832 833			
30 1 406 417	99	2 835 836			
31 1 410 419	100	2 838 839			
32 1 494 503	101	2 841 842			
33 1 240 250	102	2 844 845			
	103	3 2 847 848			
	104	2 850 851			

Angles

1	1	758	757	759	1655	1	5720	5719	5721
2	1	761	760	762	1656	1	5723	5722	5724
3	1	764	763	765	1657	1	5726	5725	5727
4	1	767	766	768	1658	1	5729	5728	5730
5	1	770	769	771	1659	1	5732	5731	5733
6	1	773	772	774	1660	1	5735	5734	5736
7	1	776	775	777	1661	1	5738	5737	5739
8	1	779	778	780	1662	1	5741	5740	5742
9	1	782	781	783	1663	1	5744	5743	5745
10	1	785	784	786	1664	1	5747	5746	5748
11	1	788	787	789	1665	1	5750	5749	5751
12	1	791	790	792	1666	1	5753	5752	5754
13	1	794	793	795	1667	1	5756	5755	5757
14	1	797	796	798	1668	1	5759	5758	5760
15	1	800	799	801	1669	1	5762	5761	5763
16	1	803	802	804	1670	1	5765	5764	5766
17	1	806	805	807	1671	1	5768	5767	5769
18	1	809	808	810	1672	1	5771	5770	5772

LAMMPS data file. CGCMM style. atom style ful generated by VMD/TopoTools v1.8 on Fri Sep 17 15:43:07 -05 2021 14253 atoms 9070 bonds 4499 angles 0 dihedrals 0 impropers 10 atom types 2 bond types 1 angle types 0 dihedral types 0 improper types 0.000305 15.525305 xlo xhi 0.049681 26.737681 ylo yhi -0.238999 149.761001 zlo zhi

Masses

1 26.981538 #Alo 2 1.0079 #Ho 3 1.0079 #Hw 4 24.3050 #Mgo 5 22.98977 #Na 6 15.9994 #Ob 7 15.9994 #Obs 8 15.9994 #Obos 9 15.9994 #Ow 10 28.0855 #Si

Pair Coeffs

1 1.3298e-6 4.2712 #Alo 2 0.0 0.0 #Ho 3 0.0 0.0 #Hw 4 9.0298e-7 5.264 #Mgo 5 0.1301 2.3500 #Na 6 0.1554 3.1655 #Ob 7 0.1554 3.1655 #Obs 8 0.1554 3.1655 #Obos 9 0.1554 3.1655 #Ow 10 1.8405e-6 3.3020 #Si

Bond Coeffs

1 554.1349 1.000 #oh-ho 2 554.1349 1.000 #ow-hw

Angle Coeffs

1 45.7696 109.47 #Hw-Ow-Hw

Atoms # full

		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	9393 1 3 0.000000 8.253151 11.286060 18.675608 # Hw	
1 1	10	0.000000 4.309476 1.450048 0.589074 # 51	9394 1 9 0.000000 10.277675 21.798004 142.859406 # Ow	
2 1	6	0.000000 0.568117 2.010496 0.012272 # Ob	9395 1 3 0.000000 9.455759 21.109505 143.146667 # Hw	
31	8	0.000000 4.315521 1.912640 2.159938 # Oo	9396 1 3 0.000000 11.222820 21.465580 143.337204 # Hw	
41	10) 0.000000 1.721977 5.898048 0.589074 # Si	9397 1 9 0.000000 4.166098 9.367703 56.051571 # Ow	
51	6	0.000000 3.155617 6.458496 0.012272 # Ob	9398 1 3 0.000000 3.949370 8.386258 55.580513 # Hw	
61	8	0.000000 1.728021 6.360640 2.159938 # Oo	9399 1 3 0 000000 4 759492 9 211202 56 976498 # Hw	
71	10) 0.000000 1.977176 1.450048 5.277121 # Si	9400 1 9 0 000000 11 249905 17 908833 91 626457 ± 0w	
8 1	6	0.000000 0.543535 2.010496 5.853922 # Ob	9401 1 3 0 000000 11 861205 17 233028 90 992653 # Hw	
91	8	0.000000 1.971132 1.912640 3.706257 # Oo	9402 1 3 0 000000 11 257254 18 930376 91 192291 # Hw	
10	1 1	0 0.000000 4.564676 5.898048 5.277121 # Si	9403 1 9 0 000000 5 594909 5 009508 96 190890 # 0w	
11	16	5 0.000000 3.131035 6.458496 5.853922 # Ob	0404 1 3 0 000000 4 574431 5 073050 05 750040 # Uw	
12	18	8 0.000000 4.558631 6.360640 3.706257 # Oo	0405 1 3 0.000000 6 156102 4 100002 05 602104 # HW	
13	1 1	LO 0.000000 1.977176 7.445952 5.277121 # Si	9405 1 5 0.000000 0.150105 4.150302 55.052104 # HW	
14	16	5 0.000000 0.543535 6.885504 5.853922 # Ob	0407 1 2 0 000000 1 70106 10 107500 116 510696 # Uw	
15	18	3 0.000000 1.971132 6.983360 3.706257 # Oo	940/ 1 3 0.000000 1./21236 19.13/303 113.310635 # HW	
16	1 1	LO 0.000000 4.564676 2.997952 5.277121 # Si	9406 1 3 0.000000 1.932633 1/.360692 116.3/925/ # HW	
17	16	5 0.000000 3.131035 2.437504 5.853922 # Ob	9409 1 9 0.000000 8.920/21 1.6/2569 30.05/2/8 # OW	
18	18	0.000000 4.558631 2.535360 3.706257 # Oo	9410 I 3 0.000000 7.300038 0.814/35 30.449152 # MW	
19	1 1	LO 0.000000 4.309476 7.445952 0.589074 # Si	9411 1 3 0.000000 /.1/0910 1.833544 28.98/886 # MW	
20	16	5 0.000000 0.568117 6.885504 0.012272 # Ob	9412 1 9 0.000000 11.151649 1/.935404 106.560646 # OW	
21	18	0.000000 4.315521 6.983360 2.159938 # Oo	9413 1 3 0.000000 10.532125 18.844690 106.707230 # HW	
22	1 1	LO 0.000000 1.721977 2.997952 0.589074 # Si	9414 1 3 0.000000 12.077902 18.203453 106.010826 # HW	
23	16	5 0.000000 3.155617 2.437504 0.012272 # Ob	9415 1 9 0.000000 13.265291 25.421061 91.604439 # OW	
24	18	3 0.000000 1.728021 2.535360 2.159938 # Oo	9416 1 3 0.000000 12.212467 25.610558 91.900673 # Hw	
25	15	5 0.000000 4.358174 6.121875 79.881271 # Na	9417 1 3 0.000000 13.449279 25.850191 90.597420 # Hw	
26	15	5 0.000000 1.770674 1.673875 79.881271 # Na	9418 1 9 0.000000 12.502433 13.806477 90.106667 # Ow	
27	1 1	0.000000 3.143326 3.416064 2.933097 # Al	9419 1 3 0.000000 13.153719 12.937126 90.335045 # Hw	
28	1 1	0.000000 0.555826 7.864064 2.933097 # Al	9420 1 3 0.000000 12.525075 14.009230 89.015579 # Hw	
29	14	+ 0.000000 3.143326 5.479936 2.933097 # Μα	9421 1 9 0.000000 9.811101 12.756308 57.785458 # Ow	
30	14	0.000000 0.555826 1.031936 2.933097 # Mg	9422 1 3 0.000000 9.939548 11.899739 58.479641 # Hw	
31	16	$5.0.000000 \pm 0.000000 \pm 0000000 \pm 0000000 \pm 00000000$	9423 1 3 0.000000 9.077729 13.471827 58.212421 # Hw	
32	- 0 1 7	7 0.000000 1.449849 0.000000 1.546319 # Ob	9424 1 9 0.000000 5.596063 2.740338 16.787752 # Ow	
33	- / 1 6	5 0.000000 2.184813 4.448000 0.000000 # Ob	9425 1 3 0.000000 6.058345 2.663756 17.793999 # Hw	
	- 0		9426 1 3 0.000000 5.364012 1.723163 16.408796 # Hw	
Bonds				
--------------	------	---	------	------
	1143	2	3967	3968
1 1 32 77	1144	2	3970	3971
2 1 34 78	1145	2	3973	3974
3 1 36 79	1146	2	3976	3977
4 1 38 80	1147	2	3979	3980
5 1 70 81	1148	2	3982	3983
6 1 72 82	1149	2	3985	3986
7 1 74 83	1150	2	3988	3989
8 1 76 84	1151	2	3991	3992
9 1 324 334	1152	2	3994	3995
10 1 576 586	1153	2	3997	3998
11 1 578 587	1154	2	4000	4001
12 1 574 585	1155	2	4003	4004
13 1 660 670	1156	2	4006	4007
14 1 744 754	1157	2	4009	4010
15 1 664 672	1158	2	4012	4013
16 1 658 669	1159	2	4015	4016
17 1 748 756	1160	2	4018	4019
18 1 742 753	1161	2	4021	4022
19 1 746 755	1162	2	4024	4025
20 1 496 504	1163	2	4027	4028
21 1 662 671	1164	2	4030	4031
22 1 580 588	1165	2	4033	4034
23 1 492 502	1166	2	4036	4037
24 1 408 418	1167	2	4039	4040
25 1 328 336	1168	2	4042	4043
26 1 412 420	1169	2	4045	4046
27 1 322 333	1170	2	4048	4049
28 1 326 335	1171	2	4051	4052
29 1 490 501	1172	2	4054	4055
30 1 406 417	1173	2	4057	4058
31 1 410 419	1174	2	4060	4061
32 1 494 503	1175	2	4063	4064
33 1 240 250	1176	2	4066	4067
34 1 156 166	1177	2	4069	4070

Ang	les				1280	1	4595	4594	4596
					1281	1	4598	4597	4599
1	1	758	757	759	1282	1	4601	4600	4602
2	1	761	760	762	1283	1	4604	4603	4605
3	1	764	763	765	1284	1	4607	4606	4608
4	1	767	766	768	1285	1	4610	4609	4611
5	1	770	769	771	1286	1	4613	4612	4614
6	1	773	772	774	1287	1	4616	4615	4617
7	1	776	775	777	1288	1	4619	4618	4620
8	1	779	778	780	1289	1	4622	4621	4623
9	1	782	781	783	1290	1	4625	4624	4626
10	1	785	784	786	1291	1	4628	4627	4629
11	1	788	787	789	1292	1	4631	4630	4632
12	1	791	790	792	1293	1	4634	4633	4635
13	1	794	793	795	1294	1	4637	4636	4638
14	1	797	796	798	1295	1	4640	4639	4641
15	1	800	799	801	1296	1	4643	4642	4644
16	1	803	802	804	1297	1	4646	4645	4647
17	1	806	805	807	1298	1	4649	4648	4650
18	1	809	808	810	1299	1	4652	4651	4653
19	1	812	811	813	1300	1	4655	4654	4656
20	1	815	814	816	1301	1	4658	4657	4659
21	1	818	817	819	1302	1	4661	4660	4662
22	1	821	820	822	1303	1	4664	4663	4665
23	1	824	823	825	1304	1	4667	4666	4668
24	1	827	826	828	1305	1	4670	4669	4671
25	1	830	829	831	1306	1	4673	4672	4674
26	1	833	832	834	1307	1	4676	4675	4677
27	1	836	835	837	1308	1	4679	4678	4680
28	1	839	838	840	1309	1	4682	4681	4683
29	1	842	841	843	1310	1	4685	4684	4686
30	1	845	844	846	1311	1	4688	4687	4689
31	1	848	847	849	1312	1	4691	4690	4692
32	1	851	850	852	1313	1	4694	4693	4695
33	1	854	853	855	1314	1	4697	4696	4698
					1315	1	4700	4699	4701

Apéndice D. Validación del lodo base.

#LAMMPS Input file	set type 7 charge -1.0808 #Oh
# Title	set type 8 charge -1.1808 #Obos
clear	set type 9 charge -0.8200 #Ow
	set type 10 charge 2.100 #si
#other settings	group water type 3 9
variable fs index 1 # 0.1 fs	kspace_style pppm 1e-4
variable ps index 100000 # 100 ps	neighbor 5.0 bin
variable nfrequ index 100 # = Neverv * Nreneat	<pre>#neigh_modify every 1 delay 5 check yes</pre>
variable nsten equal \${ns}/\${fs}	neigh_modify every 1 delay 5 check yes page 1000000 one 100000
variablenstep2_equal_\${ps;/+(25;)	# Output setting
variable heatnot equal 2000	thermo_style custom step etotal temp 1x vol press density
variable heatnut equal 2000	thermo \${nfrequ}
variable tdawn egual \$/fst*100	
variable compequal \$(15)100	# Relax calculation (U K)
* Structure settings	fin fi all ber/malar ica 0.0
# Structure settings	11X 11 all DOX/FEIAX 130 0.0
units real	minimize 1.00-10 1.00-10 20000 200000
	unita data min dat
almension 3	write_data min.dat
boundary p p p	# reset timestep and dt
timestep \${IS}	reset timestep 0
	timestep \${fs}
# Potential settings	
pair_style lj/cut/coul/long 10.0 10.0	# Output setting
special_bonds lj/coul 0.000000 1.00000 1.000000 angle yes dihedral no	dump md all custom 10000 md.lammpstrj id mol type x y z ix iy iz
pair_modify mix arithmetic	compute msd water msd com yes average yes
bond_style harmonic	
angle_style harmonic	variable Energy equal etotal
box tilt large	variable pe equal pe
#Read structure	variable ke equal ke
read_data mort_w400.dat # read initial data	variable evdwl equal evdwl
replicate 4 4 1	variable ecoul equal ecoul
set type 1 charge 1.575 #alo	
set type 2 charge 0.4250 #ho	
set type 3 charge 0.4100 #hw	
set type 4 charge 1.36 #mgo	
set type 5 charge 1.0 #Na	
set type 6 charge -1.050 #Ob	

```
velocity all create 300.0 123456789 fix ab all shake 0.0001 20 0 b 1 a 1
# ----- Equilibriation (NPT) -----
print "---- Equilibriation (NPT) start----"

        fix
        f1 all npt temp 300.0 300.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}

        run
        2000000

unfix
                 f1
# ----- Equilibriation (NVT) -----
print "----- Equilibriation (NVT) start -----"
fix
         f1 all nvt temp 300.0 300.0 ${tdamp}
                 3000000
run
                 f1
unfix
write_data equi.dat
write restart equi.restart
# ----- Constraint for Viscosity -----
fix mom all momentum 100 linear 1 1 1
#fix rigid all shake 1e-4 20 0 b 1 a 1
# ----- Viscosity -----
variable A equal 0.05e-4
variable vMax equal c cos[7]
variable Vis equal ${A}*v_density*v_lz*v_lz*100/v_vMax/39.4784
fix cos all accelerate/cos ${A}
compute cos all viscosity/cos
fix fout3 all ave/time 1 100 100 v_pe v_ke v_evdwl v_ecoul v_epair v_elong v_etail
v_temp v_press v_vol v_lx v_ly v_lz v_density v_vMax v_Vis ave running file vis.profile
 # amplitud velocidad
            # viscosidad cP
# ----- Production (NPT) -----
print "----- Production (NPT) start -----"
#fix rdf all ave/time 100 1 100 c myRDF[*] file space-rdf.rdf mode vector
fix modify f1 temp cos
                                                               # como calcula temp (no aumente por friccion)
thermo_style custom step atoms temp pe press density v_vMax v_Vis
thermo modify temp cos
          # informacion en pantalla
                   ‡ cual temperatura muestra
          ${nfrequ}
                                               # termodinamica de salida cada N pasos de tiempo
thermo
run 2000000
                                                             ‡ correr simulacion
unfix f1
                                                                # quitar fix
write data 300visc.dat
write_data MMT_npt_300_vis.dat
write restart MMT npt 300 vis.dat
include elastic.mod
```

```
#LAMMPS Input file
# Title
clear
# -----other settings -----
variable fs index 1 # 0.1 fs
variable ps index 100000 # 100 ps
variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat
variable nstep equal ${ps}/${fs}
variable nstep2 equal ${ps}/(2*${fs})
variable heatnpt equal 2000
variable heatnvt equal ${heatnpt}*7
variable tdamp equal ${fs}*100
variable pdamp equal ${fs}*1000
# ----- Structure settings -----
units real
atom style full
dimension 3
boundary ppp
timestep ${fs}
# ----- Potential settings -----
pair style lj/cut/coul/long 10.0 10.0
special bonds 1j/coul 0.000000 1.000000 1.000000 angle yes dihedral no
pair_modify mix arithmetic
bond style
             harmonic
angle style harmonic
box tilt large
#-----Read structure-----
read data mort w500.dat # read initial data
replicate 4 4 1
set type 1 charge 1.575 #alo
set type 2 charge 0.4250 #ho
set type 3 charge 0.4100 #hw
set type 4 charge 1.36 #mgo
set type 5 charge 1.0 #Na
```

```
set type 6 charge -1.050 #Ob
set type 7 charge -1.0808 #Oh
set type 8 charge -1.1808 #Obos
set type 9 charge -0.8200 #Ow
set type 10 charge 2.100 #si
group water type 3 9
kspace style pppm 1e-4
neighbor 5.0 bin
#neigh modify every 1 delay 5 check yes
neigh modify every 1 delay 5 check yes page 1000000 one 100000
# ----- Output setting -----
thermo style custom step etotal temp 1x vol press density
thermo ${nfrequ}
# ----- Relax calculation (0 K) -----
print "----- Relax calculation (0 K) -----"
fix f1 all box/relax iso 0.0
minimize 1.0e-10 1.0e-10 20000 200000
unfix
              f1
write data min.dat
# ----- reset timestep and dt -----
reset timestep 0
timestep ${fs}
# ----- Output setting -----
dump md all custom 10000 md.lammpstrj id mol type x y z ix iy iz
compute msd water msd com yes average yes
variable Energy equal etotal
variable pe equal pe
variable ke equal ke
variable evdwl equal evdwl
   . . .
          -
                 -
```

variable ecoul equal ecoul variable epair equal epair variable elong equal elong variable etail equal etail variable temp equal temp variable press equal press variable vol equal vol variable 1x equal 1x variable ly equal ly variable 1z equal 1z variable density equal density # ----- Check equilibriation setting -----#fix fout2 all ave/time 1 100 100 v_pe v_ke v_evdwl v_ecoul v_epair v_elong fix msd water ave/time 1 \${nfrequ} \${nfrequ} v_temp v_Energy v_density c_ms fix fout2 all ave/time 1 100 100 v_pe v_ke v_evdwl v_ecoul v_epair v_elong velocity all create 300.0 123456789 fix ab all shake 0.0001 20 0 b 1 a 1 # ----- Equilibriation (NPT) ----print "----- Equilibriation (NPT) start-----" f1 all npt temp 300.0 300.0 \${tdamp} iso 1.0 1.0 \${pdamp} fix 2000000 run f1 unfix # ----- Equilibriation (NVT) ----print "----- Equilibriation (NVT) start -----" fix f1 all nvt temp 300.0 300.0 \${tdamp} run 3000000 unfix f1 # ----- Constraint for Viscosity -----#fix rigid all shake 1e−4 20 0 b 1 a 1 # ----- Viscosity ----variable A equal 0.05e-4 variable vMax equal c cos[7] # extrae amplitud velocidad variable Vis equal \${A}*v_density*v_lz*v_lz*100/v_vMax/39.4784 # angstrom/fs^2 fix cos all accelerate/cos \${A} # aceleracion compute cos all viscosity/cos fix fout3 all ave/time 1 100 100 v_pe v_ke v_evdwl v_ecoul v_epair v_elong v_etail v_temp v_press v_vol v_lx v_ly v_lz v_density v_vMax v_Vis ave running file vis.profile # amplitud velocidad # viscosidad cP # ----- Production (NPT) ----print "----- Production (NPT) start -----" #fix rdf all ave/time 100 1 100 c_myRDF[*] file space-rdf.rdf mode vector fix f1 all npt temp 300.0 300.0 \${tdamp} iso 1.0 1.0 \${pdamp} # ensamblaje isotermico isobarico fix modify f1 temp cos # como calcula temp (no aumente por friccion) thermo style custom step atoms temp pe press density v vMax v Vis thermo modify temp cos # informacion en pantalla # cual temperatura muestra thermo \${nfregu} # termodinamica de salida cada N pasos de tiempo run 2000000 # correr simulacion f1 unfix # quitar fix write data 300visc.dat write data MMT npt 300 vis.dat write_restart MMT_npt_300_vis.dat include elastic.mod

Apéndice E. Cálculo de la viscosidad. #LAMMPS Input file # Title clear # -----other settings ----variable fs index 0.5 # 0.1 fs variable ps index 100000 # 100 ps variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat variable nstep equal \${ps}/\${fs} variable nstep2 equal \${ps}/(2*\${fs}) variable heatnpt equal 2000 variable heatnvt equal \${heatnpt}*7 variable tdamp equal \${fs}*100 variable pdamp equal \${fs}*1000 # ----- Structure settings ----units real atom style full dimension 3 boundary ppp timestep \${fs} # ----- Potential settings ----pair style lj/cut/coul/long 10.0 10.0 special bonds lj/coul 0.000000 1.00000 1.000000 angle yes dihedral no

pair_modify mix arithmetic bond_style harmonic angle_style harmonic box tilt large #-----Read structure-----read_data equi.dat # read initial data replicate 1 1 1 group water type 3 9 kspace_style pppm 1e-4 neighbor 5.0 bin #neigh_modify every 1 delay 5 check yes neigh_modify every 1 delay 5 check yes neigh_modify every 1 delay 5 check yes page 1000000 one 100000 # ----- Output setting ----thermo_style custom step etotal temp 1x vol press density thermo \${nfrequ}

----- reset timestep and dt ----reset_timestep 0
timestep \${fs}

----- Output setting ----dump md all custom 10000 md3.lammpstrj id mol type x y
z ix iy iz
compute msd water msd com yes average yes

variable Energy equal etotal variable pe equal pe variable ke equal ke variable evdwl equal evdwl variable ecoul equal ecoul variable epair equal epair variable elong equal elong variable etail equal etail variable temp equal temp variable press equal press variable vol equal vol variable lx equal lx variable ly equal ly variable lz equal lz

----- Check equilibriation setting -----#fix fout2 all ave/time 1 100 100 v_pe v_ke v_evdwl v_ecoul v_epair v_elong v_etail v_temp v_press v_vol v_lx v_ly v_lz v_density ave running file min.profile fix msd water ave/time 1 \${nfrequ} \${nfrequ} v_temp v_Energy v_density c_msd[*] file msddumpfile_water fix fout2 all ave/time 1 100 100 v_pe v_ke v_evdwl v_ecoul v_epair v_elong v_etail v_temp v_press v_vol v_lx v_ly v_lz v_density ave running file min.profile fix ab all shake 0.0001 20 0 b 1 a 1

```
NANOPARTÍCULAS USADAS EN LODOS DE PERFORACIÓN.
119
```

----- Constraint for Viscosity ----fix mom all momentum 100 linear 1 1 1 # momento lineal cero cada 100 timestep # ----- Viscosity ----variable A equal 0.05e-4 variable vMax equal c cos[7] # extrae amplitud velocidad variable Vis equal \${A}*v_density*v_lz*v_lz*100/v_vMax/39.4784 # angstrom/fs^2 cos all accelerate/cos \${A} fix # aceleracion compute cos all viscosity/cos fix fout3 all ave/time 1 100 100 v pe v ke v evdwl v ecoul v epair v elong v etail v temp v press v vol v lx v ly v lz v density v vMax v Vis ave running file vis.profile # ----- Production (NPT) ----print "---- Production (NPT) start ----" fix f1 all npt temp 300.0 300.0 \${tdamp} iso 1.0 1.0 \${pdamp} # ensamblaje isotermico isobarico fix modify f1 temp cos

como calcula temp (no aumente por friccion)

```
thermo style custom step atoms temp pe press density v vMax
v Vis
thermo modify temp cos
# informacion en pantalla
# cual temperatura muestra
thermo
            ${nfrequ}
# termodinamica de salida cada N pasos de tiempo
run 15000
# correr simulacion
unfix fl
# quitar fix
write data 300visc.dat
write data MMT npt 300 vis.dat
write restart MMT npt 300 vis.dat
#include elastic.mod
LAMMPS (28 Jul 2021)
OMP NUM THREADS environment is not set. Defaulting to 1 thread.
(src/comm.cpp:98)
using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
package omp 0
using multi-threaded neighbor list subroutines
package omp 4
set 4 OpenMP thread(s) per MPI task
```

```
using multi-threaded neighbor list subroutines
#LAMMPS Input file
# Title
clear
OMP NUM THREADS environment is not set. Defaulting to 1 thread.
(src/comm.cpp:98)
  using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
package omp 0
using multi-threaded neighbor list subroutines
package omp 4
set 4 OpenMP thread(s) per MPI task
using multi-threaded neighbor list subroutines
# -----other settings -----
variable fs index 0.5 # 0.1 fs
variable ps index 100000 # 100 ps
variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat
variable nstep equal ${ps}/${fs}
variable nstep equal 100000/${fs}
variable nstep equal 100000/0.5
variable nstep2 equal ${ps}/(2*${fs})
variable nstep2 equal 100000/(2*${fs})
variable nstep2 equal 100000/(2*0.5)
variable heatnpt equal 2000
variable heatnvt equal ${heatnpt}*7
variable heatnvt equal 2000*7
```

variable tdamp equal \${fs}*100 variable tdamp equal 0.5*100 variable pdamp equal \${fs}*1000 variable pdamp equal 0.5*1000 # ----- Structure settings -----Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 153.0 | 153.0 | 153.0 Mbytes Step Atoms Temp PotEng Press Density v vMax v Vis 0 25344 300.70325 -134647.52 -136.71554 1.1104271 6.3034473e-05 6555.3127 100 25344 300.77528 -134910.41 132.19363 1.109906 0.00033777171 1223.1517 200 25344 300.84988 -135150.73 -195.95081 1.1090785 0.00060960331 677.56087 300 25344 300.88406 -135375.25 51.486666 1.1095688 0.00088806034 465.17583 400 25344 298.95463 -135340.37 -287.12597 1.111127 0.0011582949 356.81543 500 25344 300.98836 -135549.63 567.25681 1.111498 0.0014287093 289.31252 600 25344 300.90274 -135657.67 -569.47652 1.1106762 0.001699101 243.2119 700 25344 298.78438 -135620.72 256.78344 1.1111374 0.001967971 210.01263 800 25344 299.90551 -135508.86 -163.70956 1.1113805 0.0022335438 185.05521

900	25344	302.52788	-135473.5	48.067234	1.1105858
0.00250	032078	165.08033			
1000	25344	299.13851	-135219.66	-78.842364	1.1102603
0.00276	690241	149.21864			
1100	25344	297.78043	-135162.4	371.93444	1.1089466
0.00304	400811	135.86051			
1200	25344	300.65259	-135387.72	-362.44134	1.1073392
0.00330	07429	124.81819			
1300	25344	302.52456	-135534.55	-93.187128	1.1072065
0.0035	736538	115.51505			
1400	25344	299.39652	-135366.03	-45.900113	1.1087655
0.00384	400654	107.55142			
1500	25344	298.34462	-135298.13	138.85784	1.1107221
0.00410	00091	100.78978			
1600	25344	300.16657	-135355.08	205.90897	
65481	1.0877	022 0.0353	372552 11.60	1438	
14200	25344	303.2706	-133835.32	87.058067	
1.08823	355 0.03	5637456	11.517082		
14300	25344	303.3014	-133871.99	-161.29057	
1.0893	792 0.0	3590705	11.434614		
14400	25344	304.2018	-133981.03	152.60256	
1.09023	374 0.03	86177717	11.352044		
14500	25344	302.2578	-133880	153.47314	
1.08999	909 0.03	6450559	11.266222		
14600	25344	302.7437	-133916.49	191.57338	
1.08901	173 0.03	6720098	11.180193		

 14700
 25344
 303.33193
 -133937.52
 -248.91116

 1.0877079
 0.036989241
 11.094393

 14800
 25344
 301.08436
 -133776.09
 330.33899

 1.0862906
 0.037263193
 11.008043
 -133940.48
 -798.49898

 1.0852101
 0.037539162
 10.923494
 -133948.15
 351.94192

 1.08595
 0.037811001
 10.847424

Loop time of 3316.97 on 4 procs for 15000 steps with 25344 atoms

Performance: 0.195 ns/day, 122.851 hours/ns, 4.522 timesteps/s 270.6% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

Section		min time		avg time		max time	%v	aravg	%total
Pair		2279.5		2279.5	I	2279.5		0.0	68.72
Bond	I	17.942		17.942	Ι	17.942	I	0.0	0.54
Kspace	I	299.72		299.72	Ι	299.72	I	0.0	9.04
Neigh	I	36.563		36.563	Ι	36.563	I	0.0	1.10
Comm	I	25.123		25.123	Ι	25.123	I	0.0	0.76
Output		1.2611	I	1.2611	Ι	1.2611	I	0.0	0.04
Modify	I	653.28		653.28	Ι	653.28	I	0.0	19.69
Other			I	3.597					0.11

MPI task timing breakdown:

Apéndice F. Validación nanopartícula de sílice.

```
#LAMMPS Input file
                                                                        kspace style pppm 1e-4
# Title
                                                                        neighbor 7.0 bin
clear
                                                                        #neigh modify every 1 delay 5 check yes
                                                                        neigh modify every 1 delay 5 check yes page 1000000 one 100000
# -----other settings -----
                                                                        # ----- Output setting -----
variable fs index 1 # 0.1 fs
                                                                        thermo style custom step etotal temp 1x vol press density
variable ps index 100000 # 100 ps
                                                                        thermo ${nfrequ}
variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat
variable nstep equal ${ps}/${fs}
                                                                        # ----- Relax calculation (0 K) -----
variable nstep2 equal ${ps}/(2*${fs})
                                                                        print "----- Relax calculation (0 K) -----"
variable heatnpt equal 2000
                                                                        fix
                                                                                   f1 all box/relax iso 0.0
variable heatnvt equal ${heatnpt}*7
                                                                       minimize 1.0e-10 1.0e-10 20000 400000
variable tdamp equal ${fs}*100
                                                                        unfix
                                                                                     f1
variable pdamp equal ${fs}*1000
                                                                        write data sio2 min.dat
# ----- Structure settings -----
                                                                        # ----- reset timestep and dt -----
units
       real
                                                                        reset timestep 0
atom style full
                                                                        timestep ${fs}
dimension 3
boundary ppp
                                                                        # ----- Output setting -----
timestep ${fs}
                                                                        dump
                                                                                    md all custom 100 md.lammpstrj id mol type x v z ix iv iz
# ----- Potential settings -----
                                                                       variable Energy equal etotal
pair style lj/cut/coul/long 10.0 10.0
                                                                        variable pe equal pe
special bonds lj/coul 0.000000 1.00000 1.000000 angle yes dihedral no
                                                                       variable ke equal ke
pair modify mix arithmetic
                                                                        variable evdwl equal evdwl
bond style harmonic
                                                                        variable ecoul equal ecoul
angle style harmonic
                                                                        variable epair equal epair
box tilt large
                                                                        variable elong equal elong
#-----Read structure-----
                                                                        variable etail equal etail
read data sio2 7A h.dat # read initial data
                                                                        variable temp equal temp
replicate 111
                                                                        variable press equal press
set type 1 charge 0.40 #hs
                                                                        variable vol egual vol
set type 2 charge -0.55 #ob
                                                                       variable 1x equal 1x
set type 3 charge -0.675 #os
                                                                       variable ly equal ly
set type 4 charge 1.1 #si
                                                                       variable 1z equal 1z
                                                                       variable density equal density
.
```

```
# ----- Check equilibriation setting -----
fix fout2 all ave/time 1 1000 1000 v_pe v_ke v_evdwl
 v ecoul v epair v elong v etail v temp v press v vol
v_lx v_ly v_lz v_density ave running file min.profile
                all create 300.0 123456789
velocity
fix ab all shake 0.0001 20 0 b 2 a 1
# ----- Equilibriation (NPT) ---
print "---- Equilibriation (NPT) start----"
                  f1 all npt temp 300.0 300.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
fix
run
                   1000000
unfix
                   f1
# ----- Equilibriation (NVT) -----
print "---- Equilibriation (NVT) start ----"
                   f1 all nvt temp 300.0 300.0 ${tdamp}
fix
run
                   2000000
unfix
                  f1
write_data 300up.dat
write_restart 300up.restart
LAMMPS (28 Jul 2021)
OMP NUM THREADS environment is not set. Defaulting to 1 thread. (src/comm.cpp:98)
 using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
package omp 0
using multi-threaded neighbor list subroutines
package omp 4
set 4 OpenMP thread(s) per MPI task
using multi-threaded neighbor list subroutines
#LAMMPS Input file
# Title
clear
OMP NUM THREADS environment is not set. Defaulting to 1 thread. (src/comm.cpp:98)
 using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
package omp 0
using multi-threaded neighbor list subroutines
package omp 4
set 4 OpenMP thread(s) per MPI task
using multi-threaded neighbor list subroutines
# ----- other settings -----
variable fs index 1 # 0.1 fs
variable ps index 100000 # 100 ps
variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat
variable nstep equal ${ps}/${fs}
variable nstep equal 100000/${fs}
variable nstep equal 100000/1
variable nstep2 equal ${ps}/(2*${fs})
variable nstep2 equal 100000/(2*${fs})
variable nstep2 equal 100000/(2*1)
variable heatnpt equal 2000
variable heatnvt equal ${heatnpt}*7
variable heatnvt equal 2000*7
variable tdamp equal ${fs}*100
variable tdamp equal 1*100
variable pdamp equal ${fs}*1000
variable
         pdamp equal 1*1000
# ----- Structure settings -----
```

units real atom style full dimension 3 boundary ppp timestep \${fs} timestep 1 # ----- Potential settings ----pair style lj/cut/coul/long 10.0 10.0 special bonds 1j/coul 0.000000 1.000000 1.000000 angle yes dihedral no pair modify mix arithmetic bond style harmonic angle style harmonic box tilt large #-----Read structure----read data sio2 7A h.dat # read initial data Reading data file ... orthogonal box = (-0.90863800 -0.25699000 0.41330600) to (19.091362 19.743010 20.413306) 1 by 1 by 1 MPI processor grid reading atoms ... 270 atoms scanning bonds ... 2 = max bonds/atom scanning angles ... 9 = max angles/atom reading bonds ... 296 bonds reading angles ... 434 angles Finding 1-2 1-3 1-4 neighbors ... special bond factors 1j: 0 1 1 special bond factors coul: 0 1 1 4 = max # of 1-2 neighbors 4 = max # of special neighbors special bonds CPU = 0.003 seconds read data CPU = 0.028 seconds

----- Relax calculation (0 K) ----print "---- Relax calculation (0 K) -----" ----- Relax calculation (0 K) ----f1 all box/relax iso 0.0 fix minimize 1.0e-10 1.0e-10 20000 400000 WARNING: Using 'neigh modify every 1 delay 0 check yes' setting during minimization (; PPPM initialization ... using 12-bit tables for long-range coulomb (src/kspace.cpp:340) G vector (1/distance) = 0.27622201 grid = 12 12 12 stencil order = 5 estimated absolute RMS force accuracy = 0.013250594 estimated relative force accuracy = 3.990377e-05 using double precision FFTW3 3d grid and FFT values/proc = 9261 1728 Last active /omp style is kspace style pppm/omp Neighbor list info ... update every 1 steps, delay 0 steps, check yes max neighbors/atom: 100000, page size: 1000000 master list distance cutoff = 17 ghost atom cutoff = 17 binsize = 8.5, bins = 3 3 3 1 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 0 0 (1) pair lj/cut/coul/long/omp, perpetual attributes: half, newton on, omp pair build: half/bin/newton/omp stencil: half/bin/3d bin: standard Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 27.60 | 27.60 | 27.60 Mbytes Step TotEng Temp Lx Volume Press Density 0 24309.962 0 20 8000 252571.26 0.8430090
 0
 24505.551

 100
 23472.16
 0

 200
 22724.298
 0

 300
 22059.712
 0

 21473.253
 0

 20.2
 8242.408
 221360.52
 0.818216

 20.4
 8489.664
 193230.2
 0.7943862

 20.6
 8741.816
 167756.68
 0.7714727

 20.8
 8988.912
 144598.53
 0.7444727
 20.2 8242.408 221360.52 0.818216 20.8 8998.912 144599.53 0.74943 2999500 14866.318 299.99068 18.258628 6087.0152 -1091.2875 1.1079441 2999600 14883.572 291.6478 18.258628 6087.0152 706.76282 1.1079441 2999700 14909.431 322.08336 18.258628 6087.0152 967.50566 1.1079441 2999800 14904.996 326.65326 18.258628 6087.0152 -1020.3175 1.1079441 2999900 14879.135 300.74705 18.258628 6087.0152 -1954.6968 1.1079441 3000000 14871.643 311.72824 18.258628 6087.0152 4601.504 1.1079441 Loop time of 4198.93 on 4 procs for 2000000 steps with 270 atoms Performance: 41.153 ns/day, 0.583 hours/ns, 476.312 timesteps/s 178.9% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads MPI task timing breakdown: Section | min time | avg time | max time |%varavg| %total _____ Pair | 1933.4 | 1933.4 | 1933.4 | 0.0 | 46.04 Bond | 369.91 | 369.91 | 369.91 | 0.0 | 8.81 Kspace | 1067.1 | 1067.1 | 1067.1 | 0.0 | 25.41 Neigh | 2.3042 | 2.3042 | 2.3042 | 0.0 | 0.05 Comm | 97.157 | 97.157 | 97.157 | 0.0 | 2.31 | 21.242 | 0.0 | 0.51 | 0.0 | 16.69 | | 0.17 Output | 21.242 | 21.242 Modify | 700.84 | 700.84 Other | | 7.005 | 700.84 1 Nlocal: 270.000 ave 270 max 270 min Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 Nghost: 6555.00 ave 6555 max 6555 min Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 Neighs: 120991.0 ave 120991 max 120991 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Apéndice G. Validación del lodo base con adición de nanosílice.

```
set type 1 charge 0.40 #hs
#LAMMPS Input file
                                                             set type 2 charge -0.55 #ob
# Title
                                                             set type 3 charge -0.675 #os
clear
                                                             set type 4 charge 1.1 #si
# -----other settings -----
                                                             # read data water
variable fs index 1 # 0.1 fs
                                                            read data mort 400 con h.dat add append offset 4 2 3 0 0
variable ps index 100000 # 100 ps
                                                          set type 5 charge 1.575 #alo
variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat
                                                           set type 6 charge 0.4250 #ho
variable nstep equal ${ps}/${fs}
                                                           set type 7 charge 0.4100 #hw
variable nstep2 equal ${ps}/(2*${fs})
                                                            set type 8 charge 1.36 #mgo
variable heatnpt equal 2000
                                                           set type 9 charge 1.0 #Na
variable heatnvt equal ${heatnpt}*7
                                                           set type 10 charge -1.050 #Ob
variable tdamp equal ${fs}*100
                                                            set type 11 charge -1.0808 #Oh
variable pdamp equal ${fs}*1000
                                                            set type 12 charge -1.1808 #Obos
# ----- Structure settings -----
                                                            set type 13 charge -0.8200 #Ow
units real
                                                            set type 14 charge 2.100 #si
atom style full
                                                             group water type 7 13
dimension 3
boundary ppp
                                                             kspace style pppm 1e-4
timestep ${fs}
                                                             neighbor 5.0 bin
                                                             #neigh modify every 1 delay 5 check yes
# ----- Potential settings -----
                                                             neigh modify every 1 delay 5 check yes page 1000000 one 100000
pair style lj/cut/coul/long 10.0 10.0
                                                             # ----- Output setting -----
special bonds 1j/coul 0.000000 1.000000 1.000000 angle yes dihedral thermo style custom step etotal temp 1x vol press density
pair modify mix arithmetic
                                                             thermo ${nfrequ}
bond style harmonic
angle style harmonic
                                                             # ----- Relax calculation (0 K) -----
box tilt large
                                                             print "---- Relax calculation (0 K) -----"
#-----Read structure-----
                                                            fix f1 all box/relax iso 0.0
                                                            minimize 1.0e-10 1.0e-10 40000 400000
unfix f1
#read data mort 400 con h.dat # read initial data
                                                           minimize
#read data mort 400 con h.dat extra/atom/types 4
extra/bond/types 2 extra/angle/types 3 extra/dihedral/types write data min.dat
0 extra/improper/types 0 extra/bond/per/atom 0
extra/angle/per/atom 0 extra/dihedral/per/atom 0
read data sio2 7A 400.dat extra/atom/types 10
extra/bond/types 2 extra/angle/types 1 extra/dihedral/types
```

```
131
variable Energy equal etotal
variable pe equal pe
variable ke equal ke
variable evdwl equal evdwl
variable ecoul equal ecoul
variable epair equal epair
variable elong equal elong
variable etail equal etail
variable temp equal temp
variable press equal press
variable vol equal vol
variable 1x equal 1x
variable ly equal ly
variable lz equal lz
variable density equal density
# ----- Check equilibriation setting -----
#fix fout2 all ave/time 1 100 100 v pe v ke v evdwl v ecoul v epair v e
#fix msd water ave/time 1 ${nfrequ} ${nfrequ} v temp v Energy v density
fix fout2 all ave/time 1 100 100 v pe v ke v evdwl v ecoul v epair v el
velocity all create 300.0 123456789
#fix ab all shake 0.0001 20 0 b 1 a 1
# ----- Equilibriation (NPT) -----
print "---- Equilibriation (NPT) start----"
fix
               f1 all npt temp 300.0 300.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
               1000000
run
unfix
               f1
# ----- Equilibriation (NVT) -----
print "---- Equilibriation (NVT) start ----"
fix
               f1 all nvt temp 300.0 300.0 ${tdamp}
               2000000
run
unfix
               f1
write data equi.dat
write restart equi.restart
```

LAMMPS (29 Oct 2020) OMP NUM THREADS environment is not set. Defaulting to 1 thread. (src/lammps/lammps-290ct20/src/comm.cpp:94) using 1 OpenMP thread(s) per MPI task #LAMMPS Input file # Title clear OMP NUM THREADS environment is not set. Defaulting 1# ----- Potential settings -----(src/lammps/lammps-290ct20/src/comm.cpp:94) pair_style lj/cut/coul/long 10.0 10.0 special bonds lj/coul 0.000000 1.00000 1.000000 angle yes dihedral no using 1 OpenMP thread(s) per MPI task pair modify mix arithmetic bond style harmonic # -----other settings ----angle style harmonic variable fs index 1 # 0.1 fs variable ps index 100000 # 100 ps box tilt large variable ps index 100000 # 100 ps variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat #read_data_mort_400_con_h.dat # read_initial_data variablenstep equal \${ps}/\${fs}#read data mort 400 con h.dat # read initial datavariablenstep equal \${ps}/\${fs}#read data mort 400 con h.dat extra/atom/types 4variablenstep equal 100000/\${fs}extra/bond/types 2 extra/angle/types 3 extra/dihedral/typesvariablenstep equal \${ps}/(2*\${fs})0 extra/improper/types 0 extra/dihedral/per/atom 0variablenstep2 equal \${ps}/(2*\${fs})extra/angle/per/atom 0 extra/dihedral/per/atom 0variablenstep2 equal 100000/(2*\${fs})extra/bond/types 2 extra/angle/types 10variablenstep2 equal 100000/(2*1)extra/improper/types 0variablehstept equal 100000/(2*1)0 extra/improper/types 0 variable heatnpt equal 2000 Reading data file ... variable heatnvt equal \${heatnpt}*7 orthogonal box = (0.0585 -0.1115 -0.154502) to (15.583500 26.576500 149.84550) 1 by 1 by 8 MPI processor grid variable heatnvt equal 2000*7 reading atoms ... variable tdamp equal \${fs}*100 270 atoms variable tdamp equal 1*100 scanning bonds ... variable pdamp equal \${fs}*1000 2 = max bonds/atom variable pdamp equal 1*1000 scanning angles ... # ----- Structure settings -----9 = max angles/atom units real reading bonds ... atom style full 296 bonds reading angles ... dimension 3 434 angles boundary ppp Finding 1-2 1-3 1-4 neighbors ... timestep \${fs} special bond factors lj: 0.0 1.0 1.0 special bond factors coul: 0.0 1.0 1.0 timestep 1

```
update every 1 steps, delay 0 steps, check yes
max neighbors/atom: 100000, page size: 1000000
master list distance cutoff = 15
ghost atom cutoff = 15
binsize = 7.5, bins = 3 4 20
1 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 0 0
(1) pair lj/cut/coul/long, perpetual
attributes: half, newton on
pair build: half/bin/newton
stencil: half/bin/ad/newton
bin: standard
Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 28.92 | 32.00 | 33.16 Mbytes
Step TotEng Temp Lx Volume Press Density
0 1.1910691e+08 0 15.525 62149.68 5.2561058e+08 2.2069557
100 78218805 0 15.68025 64032.877 3.349083e+08 2.1420495
200 58039845 0 15.8355 65953.738 2.4113172e+08 2.0796637
300 45974903 0 15.99075 67912.633 1.8534362e+08 2.0196771
400 37788838 0 16.146 69909.938 1.478251e+08 1.9619756
500 31766009 0 16.30125 71946.023 1.2057349e+08 1.9064513
600 27097727 0 16.4565 74021.263 99787286 1.8530026
700 23353163 0 16.61175 76136.03 83417363 1.8015333
800 20278903 0 16.767 78290.698 7024240 1.7519526
900 17713532 0 16.92225 80485.638 59475112 1.7041748
1000 15547488 0 17.0775 82721.224 50575919 1.6581185
```

special bonds CPU = 0.001 seconds MPS Input file read data CPU = 0.083 seconds set type 5 charge 1.575 #alo Setting atom values ...

 36 settings made for charge
 ---other settings ----

 set type 6 charge 0.4250 #ho
 able fs index 1 # 0.1 fs

 Setting atom values ...
 able ps index 100000 # 100 ps

 72 settings made for charge
 able nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat

 set type 7 charge 0.4100 #hw
 able nstep equal \${ps}/\${fs}

 Setting atom values
 able nstep equal \${ps}/\${fs}

 Setting atom values ...
 7198 settings made for charge
 able
 hstepp equal (pp), (2 + (12))

 7198 settings made for charge
 able
 heatnpt equal 2000

 set type 8 charge
 1.36 #mgo
 able
 heatnvt equal \${heatnpt}*7

 Setting atom values ...
 able
 tdamp equal \${fs}*100
 Setting atom values ...
 36 settings made for charge
 able pdamp equal \${fs}*1000

 set type 9 charge 1.0 #Na
 ---- Structure settings ---- Setting atom values ... Setting atom values ... 216 settings made for charge set type 11 charge -1.0808 #Oh Setting atom values ... Setting atom values ... 144 settings made for charge set type 13 charge -0.8200 #Ow Setting atom values ...

 3599 settings made for charge
 --Read structure-----

 set type 14 charge 2.100 #si
 d_data mort_400_con_h.dat # read initial data

 Setting atom values ... group water type 7 13 10797 atoms in group water

tle r able nstep2 equal \${ps}/(2*\${fs}) able tdamp equal \${fs}*100 s real dary ppp step \${fs} --- Potential settings -----modify mix arithmetic style harmonic e_style harmonic tilt large

 etting atom values ...
 d data mort 400 con h.dat extra/atom/types 4 extra/bond/types 2 extra

 144 settings made for charge
 data sio2 7A 400.dat extra/atom/types 10 extra/bond/types 2 extra/an

 type 1 charge 0.40 #hs type 2 charge -0.55 #ob set type 3 charge -0.675 #os set type 4 charge 1.1 #si

301.25729 19.326038 2999700 -72366.63 119887.13 892.14691 1.1440894 2999800 -72476.454 299.00279 19.326038 119887.13 -360.98155 1.1440894 2999900 -72455.097 296.96351 19.326038 119887.13 -706.36828 1.1440894 3000000 -72323.501 298.62364 19.326038 119887.13 -230.90364 1.1440894 Loop time of 107156 on 8 procs for 2000000 steps with 11823 atoms Performance: 1.613 ns/day, 14.883 hours/ns, 18.664 timesteps/s 98.3% CPU use with 8 MPI tasks x 1 OpenMP threads MPI task timing breakdown: Section | min time | avg time | max time |%varavg| %total ----------
 Pair
 | 71737
 | 81427
 | 87501
 | 1909.6
 | 75.99

 Bond
 | 273.86
 | 360.11
 | 491.45
 | 324.3
 | 0.34

 Kspace
 | 15557
 | 21662
 | 31397
 | 3711.0
 | 20.22

 Neigh
 | 1822.9
 | 1824
 | 1824.9
 | 1.7
 | 1.70

 Neigh
 | 1822.9
 | 1824
 | 1824.9
 | 1.7
 1.70

 Comm
 | 1156.5
 | 1232.4
 | 1321
 | 157.4
 | 1.15

 Output
 | 4.0925
 | 4.3987
 | 6.4862
 | 37.6
 | 0.00

 Modify
 | 415.17
 | 452.84
 | 476.8
 | 102.4
 | 0.42

 Other
 |
 | 192.8
 |
 |
 | 0.18
 # ----- Output setting ----dump md all custom 10000 md.lammpstrj id r compute msd water msd com yes average yes variable Energy equal etotal variable pe equal pe variable ke equal ke variable evdwl egual evdwl variable ecoul equal ecoul variable epair equal epair variable elong equal elong variable etail equal etail variable temp equal temp variable press equal press variable vol equal vol variable 1x equal 1x variable ly equal ly variable lz equal lz variable density equal density # ----- Check equilibriation setting -----#fix fout2 all ave/time 1 100 100 v_pe v_ke v_evdw. #fix msd water ave/time 1 \${nfrequ} \${nfrequ} v ter fix fout2 all ave/time 1 100 100 v pe v ke v evdwl velocity all create 500.0 123456789 #fix ab all shake 0.0001 20 0 b 1 a 1 # ----- Equilibriation (NPT) ----print "---- Equilibriation (NPT) start----" f1 all npt temp 500.0 500.0 \${tdamp} fix 1000000 run f1 unfix

```
# read data water
read data mort 400 con h.dat add append offset 4 2 3 0 0
set type 5 charge 1.575 #alo
set type 6 charge 0.4250 #ho
set type 7 charge 0.4100 #hw
set type 8 charge 1.36 #mgo
set type 9 charge 1.0 #Na
set type 10 charge -1.050 #Ob
set type 11 charge -1.0808 #Oh
set type 12 charge -1.1808 #Obos
set type 13 charge -0.8200 #Ow
set type 14 charge 2.100 #si
group water type 7 13
kspace style pppm 1e-4
neighbor 5.0 bin
#neigh modify every 1 delay 5 check yes
neigh modify every 1 delay 5 check yes page 1000000 one 100000
# ----- Output setting -----
thermo style custom step etotal temp 1x vol press density
             ${nfrequ}
thermo
# ----- Relax calculation (0 K) -----

        fix
        f1 all box/relax iso 0.0

        minimize
        1.0e-10 1.0e-10 40000 400000

        unfix
        f1

print "----- Relax calculation (0 K) -----"
write data min.dat
# ----- reset timestep and dt -----
reset timestep 0
timestep
             ${fs}
# ----- Equilibriation (NVT) -----
print "---- Equilibriation (NVT) start -----"
                   f1 all nvt temp 500.0 500.0 ${tdamp}
fix
                   2000000
run
unfix
                   f1
write data equi.dat
write restart equi.restart
```

```
LAMMPS (29 Oct 2020)
OMP NUM THREADS environment is not set.
Defaulting to 1 thread.
(src/lammps/lammps-290ct20/src/comm.cpp:94) pair_modify mix arithmetic
 using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
#LAMMPS Input file
# Title
clear
OMP NUM THREADS environment is not set.
Defaulting to 1 thread.
```

```
# -----other settings -----
variable fs index 1 # 0.1 fs
variable ps index 100000 # 100 ps
variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat scanning bonds ...
variable nstep equal ${ps}/${fs}
variable nstep equal 100000/${fs}
variable nstep equal 100000/1
variable nstep2 equal ${ps}/(2*${fs})
variable nstep2 equal 100000/(2*1)
variable heatnpt equal 2000
variable heatnyt equal ${heatnpt}*7

variable heatnyt equal 2000*7

Finding 1-2 1-3 1-4 neighbors ...
variable heatnvt equal 2000*7
variable tdamp equal ${fs}*100
variable tdamp equal 1*100
variable pdamp equal ${fs}*1000
variable pdamp equal 1*1000
# ----- Structure settings -----
units real
atom style full
dimension 3
boundary ppp
timestep ${fs}
timestep 1
```

```
# ----- Potential settings -----
                                                   pair style lj/cut/coul/long 10.0 10.0
                                                   special bonds lj/coul 0.000000 1.00000 1.000000 angle yes dih
                                                                    harmonic
                                                   bond style
                                                     angle style harmonic
                                                     box tilt large
                                                    #----Read structure-----
                                                    #read data mort 400 con h.dat # read initial data
                                                   #read data mort 400 con h.dat extra/atom/types 4 extra/bond/type
(src/lammps/lammps-290ct20/src/comm.cpp:94)
using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
Reading data sio2_7A_400.dat extra/atom/types 10 extra/bond/types :
Reading data file ...
                                                      orthogonal box = (0.0585 -0.1115 -0.154502) to (15.583500 26.
                                                      1 by 1 by 8 MPI processor grid
                                                     reading atoms ...
                                                      270 atoms
                                                     2 = max bonds/atom
                                                    scanning angles ...
                                                     9 = max angles/atom
                                                    reading bonds ...
                                                     296 bonds
                                                     reading angles ...
                                                      434 angles
                                                    special bond factors lj: 0.0 1.0 1.0
                                                     special bond factors coul: 0.0 1.0 1.0
                                                        4 = max # of 1-2 neighbors
4 = max # of special neighbors
                                           special bonds CPU = 0.001 seconds
read_data CPU = 0.023 seconds
set type 1 charge 0.40 #hs
```

set type 1 charge 0.40 #hs Setting atom values ... 64 settings made for charge set type 2 charge -0.55 #ob Setting atom values ... 84 settings made for charge set type 3 charge -0.675 #os Setting atom values ... 64 settings made for charge set type 4 charge 1.1 #si Setting atom values ... 58 settings made for charge # read data water read_data mort_400 con h.dat add append offset 4 2 3 0 0 set type 9 charge 1.0 #Na Reading data file ... orthogonal box = (0.0585 - 0.1115 - 0.154502) to (15.583500 26.576500 149.84550) 1 by 1 by 8 MPI processor grid reading atoms ... 11553 atoms scanning bonds ... 2 = max bonds/atom scanning angles ... 1 = max angles/atom reading bonds ... 7270 bonds reading angles ... 3599 angles Finding 1-2 1-3 1-4 neighbors ... special bond factors lj: 0.0 1.0 1.0 special bond factors coul: 0.0 1.0 1.0

special bonds CPU = 0.001 seconds read data CPU = 0.097 seconds set type 5 charge 1.575 #alo Setting atom values ... 36 settings made for charge set type 6 charge 0.4250 #ho Setting atom values ... 72 settings made for charge set type 7 charge 0.4100 #hw Setting atom values ... 7198 settings made for charge set type 8 charge 1.36 #mgo Setting atom values ... 36 settings made for charge Setting atom values ... 36 settings made for charge set type 10 charge -1.050 #Ob Setting atom values ... 216 settings made for charge set type 11 charge -1.0808 #Oh Setting atom values ... 72 settings made for charge set type 12 charge -1.1808 #Obos Setting atom values ... 144 settings made for charge set type 13 charge -0.8200 #Ow Setting atom values ... 3599 settings made for charge set type 14 charge 2.100 #si Setting atom values ... 144 settings made for charge group water type 7 13 10797 atoms in group water

<pre>Neighbor list info update every 1 steps, delay 0 steps, check yes max neighbors/atom: 100000, page size: 1000000 master list distance cutoff = 15 ghost atom cutoff = 15 binsize = 7.5, bins = 3 4 20 1 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 0 0</pre>									
(1) pair	: lj/cut/coul/long	g, perpetual							
attr	ributes: half, new	wton on							
pair	build: half/bin,	/newton							
ster	cil: half/bin/3d,	/newton							
bin:	standard		()						
Per MPI ra	ank memory allocat	cion (min/av	g/max) = 28	.92 32.00	33.16 Mbytes				
Step loten	ig lemp Lx volume	Press Densi	15 535	62140 60 5	2561058-108	2 2060557			
100	79219905	~	15.525	62119.00 3	2400936109	2.2069557			
200	50210000		15 00025	61032.077 3.	41121726+00	2.1120155			
300	45974903	0	15 00075	67012 633 1	8534362e±08	2.0/9003/			
400	37788838	0	16 146	69909 938 1	478251e±08	1 9619756			
500	31766009	ő	16.30125	71946.023 1.	2057349e+08	1.9064513			
600	27097727	0	16.4565	74021.263	99787286	1.8530026			
700	23353163	õ	16.61175	76136.03	83417363	1.8015333			
800	20278903	0	16.767	78290.698	70242440	1.7519526			
900	17713532	0	16,92225	80485.638	59475112	1.7041748			
1000	15547488	0	17.0775	82721.224	50575919	1.6581185			
1100	13702532	0	17.23275	84997.829	43157517	1.613707			
1200	12120535	0	17.388	87315.826	36931731	1.5708675			
1300	10756948	0	17.54325	89675.587	31678299	1.529531			
1400	9576765.3	0	17.6985	92077.486	27225194	1.4896323			
1500	8551930.9	0	17.85375	94521.895	23435820	1.4511092			
1600	7659630.6	0	18.009	97009.187	20200386	1.4139031			

2999800	-52613.317	494.41266	20.618955	145594.17	-341.38749	0.94208162
2999900	-52541.546	500.02793	20.618955	145594.17	-22.430494	0.94208162
3000000	-52443.835	495.97931	20.618955	145594.17	-122.17443	0.94208162
Loop time	of 103092 on	8 procs for	2000000 steps	with 11823 at	toms	

Performance: 1.676 ns/day, 14.318 hours/ns, 19.400 timesteps/s
97.4% CPU use with 8 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:								
Section	min time	1	avg time	I.	max time	%varavg	<pre>%total</pre>	
Pair	59722	1	67995	I.	74560	1937.5	65.96	
Bond	287.99	1	346.44	I.	457.67	259.2	0.34	
Kspace	22873	1	29461	I.	37796	2943.6	28.58	
Neigh	3077.4	1	3078.9	I.	3080	1.5	2.99	
Comm	1435	1	1509.9	I.	1564.5	114.3	1.46	
Output	4.1793	1	4.3007	I.	5.1298	15.1	0.00	
Modify	437.77	1	468.39	I.	501.01	96.8	0.45	
Other	L	1	227.9	I.		1 1	0.22	