

**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 mi 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 traspasadas, 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.	5
5. Selección de nanopartícula	47
5.1 Generalidades de la nanotecnología y las nanopartículas de sílice	48
5.2 Ventajas de las nanopartículas de sílice en el control del filtrado del lodo base agua	53
6. Metodología	55
6.1 Estructura cristalográfica de la montmorillonita	56
6.2 Estructura cristalográfica de la nanopartícula de sílice	57
6.3 Modificación de las estructuras cristalográficas	58
6.4 Parametrización de la montmorillonita de acuerdo con el campo de fuerza utilizado	59
6.5 Método de simulación para validar el modelo de lodo base	59
6.6 Parametrización de las nanopartículas de sílice de acuerdo con el campo de fuerza utilizado	60
6.7 Método de simulación para validar el modelo de las nanopartículas de sílice	61
6.8 Simulación modelo base con adición de nanopartículas de sílice	62
7. Resultados y análisis de resultados	64
7.1 Validación de los modelos	64
7.1.1 Validación del lodo base	64
7.1.2 Validación de la nanopartícula de sílice	69
7.1.3 Validación de los modelos de lodo base con adición de nanosílice	71
7.2 Análisis de resultados	77
8. Conclusiones	83
9. Recomendaciones	84
Referencias Bibliográficas	85
Apéndices	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. Pérdidas 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.
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 SiO_2 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 SiO_2 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 proporcionarían 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 SiO_2 nanoparticles chosen through the analysis of papers where experimental tests were carried out with different types of nanoparticles, being SiO_2 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 water-based 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 petróleo. 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, pérdida 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.

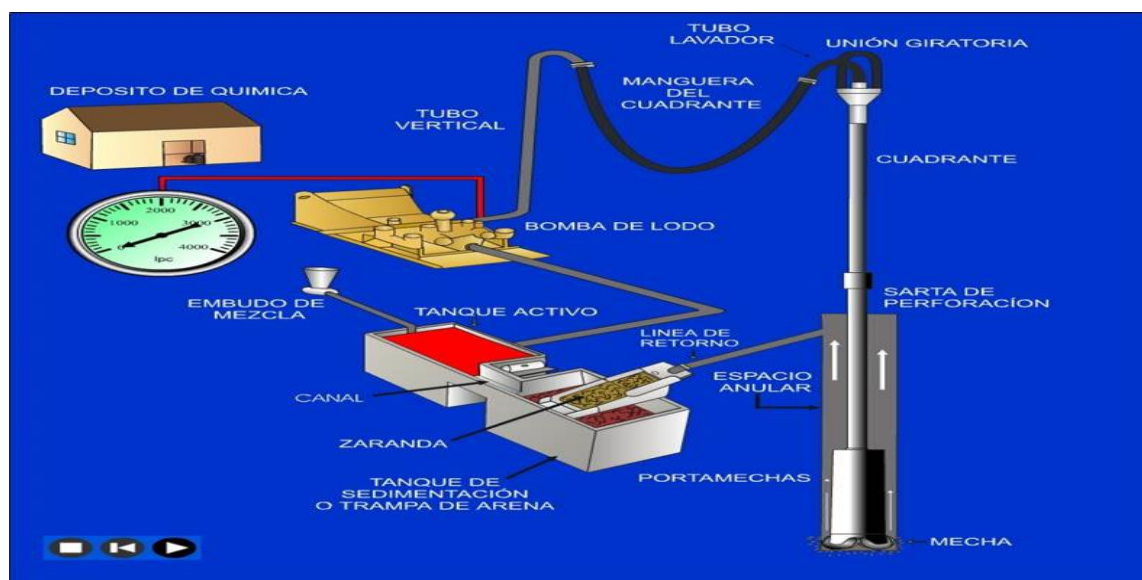
2. Marco Teórico

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.

Ciclo del fluido de perforación.



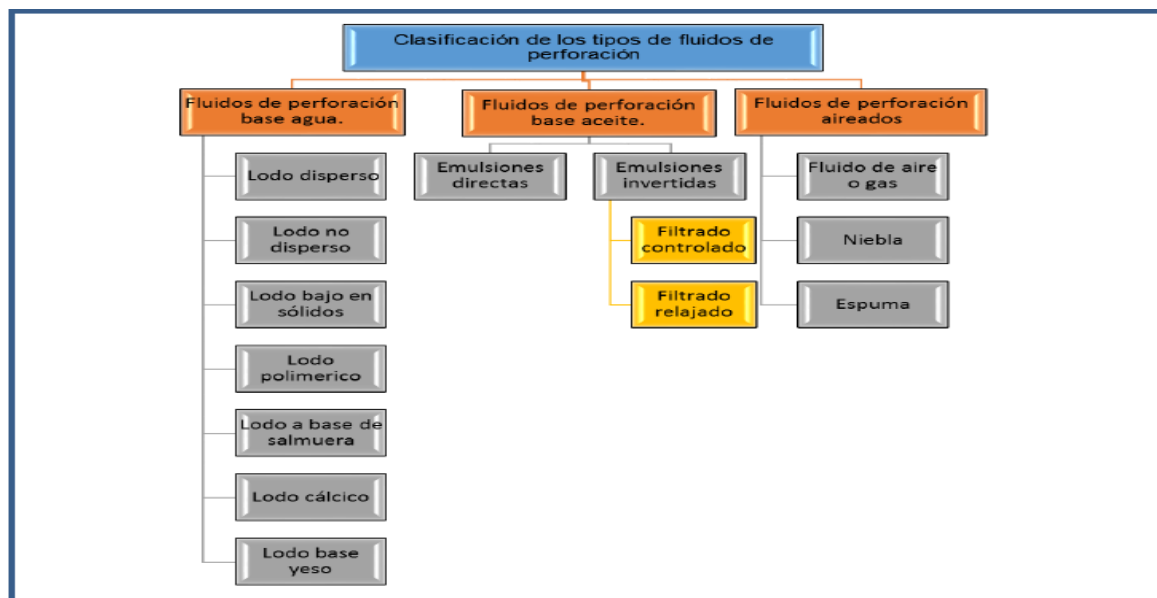
Nota: Adaptado de PDVSA CIED. Manual de fluidos de perforación. 2009. P13

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 aditivo en estos lodos. Desafortunadamente, los aditivos 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.

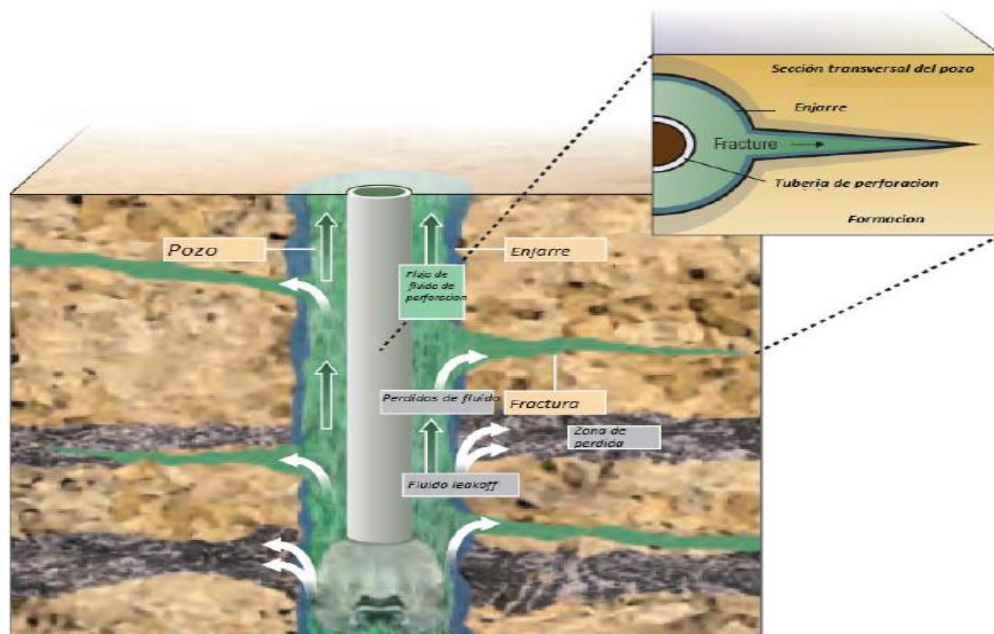
2.2 Pérdidas de fluido

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



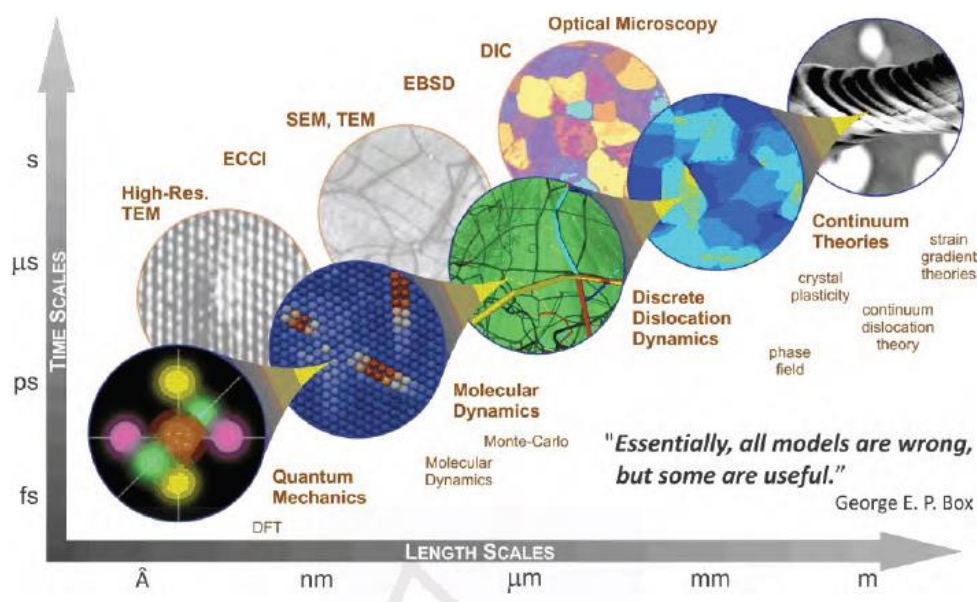
Nota: Adaptado de Nanoparticles: Promising Solution to Overcome Stern Drilling Problems, Dr. JamilAbdo, M. Danish Haneef, collage of Engineering Mechanical

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

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

Donde $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 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:

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

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):

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \sigma_1 \alpha_1 g_k^T d_k \quad (4)$$

$$\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma_2 g_k^T d_k \quad (5)$$

Donde $0 < \sigma_1 \leq \sigma_2 < 1$. 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).

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

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 $\|g_{k+1}\| \leq \varepsilon$, 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:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla)u = \rho a - \nabla p + \eta \nabla^2 u \quad (7)$$

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:

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

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.

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

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

			mesoscópica o continua.		
GROMACS	Simulador con código abierto. Las propiedades físicas macroscópicas se pueden distinguir por propiedades de equilibrio estático. Describe las propiedades de sistemas moleculares con alta precisión. El modelado molecular se basa completamente en una similitud al análisis de datos estructurales y químicos conocidos.	Linux Windows Mac	Funciona muy bien para moléculas con estructuras representativas. Conserva la energía para potenciales tipo Lennard-Jones	El conocimiento de una sola estructura, incluso si es la estructura del mínimo energético global, no es suficiente. Para calcular propiedades macroscópicas es necesario generar un conjunto representativo en un determinado de temperatura. No funciona bien cuando la molécula no es puntual. El cálculo de energías libres y potenciales termodinámicos requieren extensiones especiales de técnicas de simulación molecular.	Simulación de dinámica. Química computacional. Simulación dinámica en paralelo. Minimización de energía
	Admite algoritmos que	Linux	Un novedoso método	No se puede construir	Simulaciones de

DESMOND	se utilizan normalmente para realizar moléculas rápidas precisas. La energía y las fuerzas electrostáticas 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 relativa.		paralelo de el sistema de sistemas de descomposición que moléculas requiere de biológicos. reduce en gran medida otros programas Simulación de el requisito para la Requiere de campos de sistemas químicos comunicación entre de fuerza como AMBER Y procesadores. Emplea nuevas técnicas CHARMM numéricas que le No permite la permiten utilizar visualización de su cálculos de precisión simulación de manera simple manteniendo una interactiva alta precisión. Modelara con precisión relaciones termodinámicas que dependen de un equilibrio detallado y también dan como resultado una energía muy baja.	
	Se dirige principalmente a sistemas biológicos que incluyen péptidos, proteínas, grupos protésicos Contiene un conjunto completo de	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
CHARMM				

AMBER	herramientas de análisis y creación de modelos.		como en otros simuladores de dinámica molecular	Licencia con costo para usuarios académicos.	
	Es un paquete con licencia desarrollada por más de 40 investigadores de distintas universidades de Estados Unidos. Existen muchos campos de fuerza incorporados. Este paquete posee numerosos programas para la instalación, desarrollo y análisis de dinámica molecular.	Linux Osx10.8.4	Posee 3 motores de simulación Sander, PMEMD, PMEMD.CUDA Es un paquete de programas de simulaciones molecular que incluye código fuente y demostraciones	Necesita la determinación de cargas parciales mediante ajustes al potencial electrostático. Los valores que se obtienen son mínimos locales no mínimos absolutos. La imagen que se muestra de la molécula es estática, por lo cual los cálculos no son suficientes para predecir el comportamiento dinámico del sistema estudiando (método cuántico)	Se utiliza para realizar simulaciones a escala atomística Química computacional Simulación dinámica paralelo
	Tiene interfaz gráfica llamada VMD, que a su vez es estable y compatible con otros programas	Linux	Solo es necesario parametrizar la molécula sin necesidad de describir el tipo de interacción	El uso no es común en la simulación de polielectrolitos y no se conoce un estudio reportado que lo	Se utiliza para realizar simulaciones a escala atomística Química

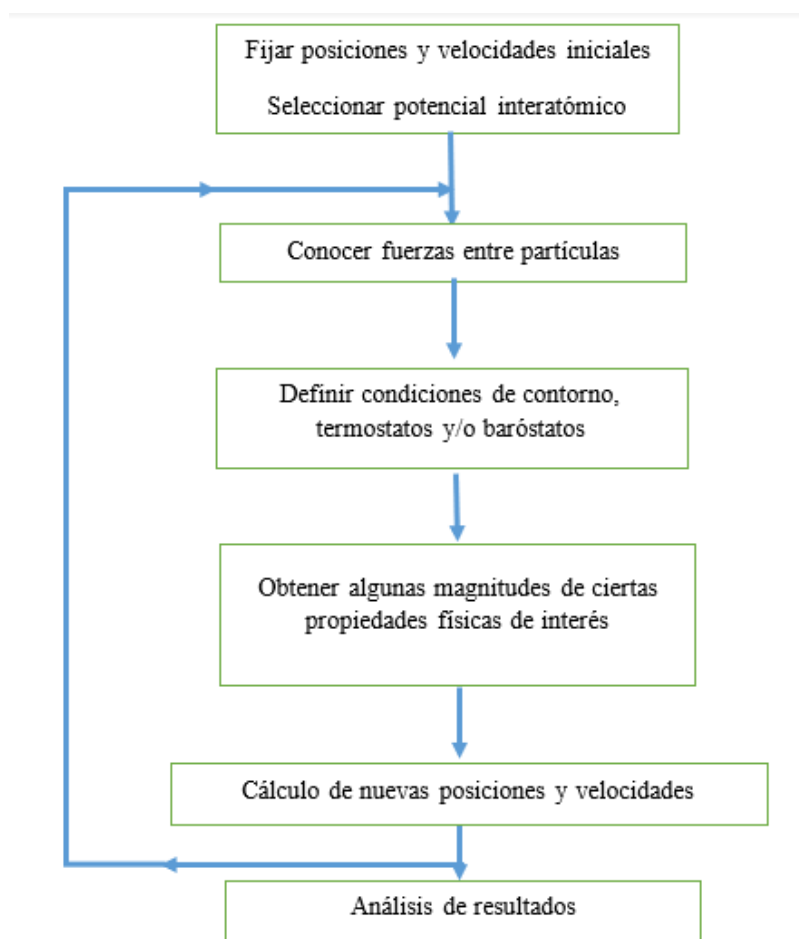
NAMD	Es un código en paralelo de dinámica molecular diseñado para simulaciones de alto desempeño de sistemas biomoleculares grandes	El código fuente está en c y c++, disponible para modificaciones por parte del usuario Escalabilidad Da al usuario la posibilidad de crear un propio campo de fuerza	emplee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

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, sólido 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:

1. Generación de la geometría del sólido con ciertos comandos incluidos en el paquete de lammps como (*lattice*, *create_box*, *create_atoms*).
2. Con la lectura de un archivo externo de posiciones llamado *input* mediante *read_data*
3. 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 físico 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 sólida 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

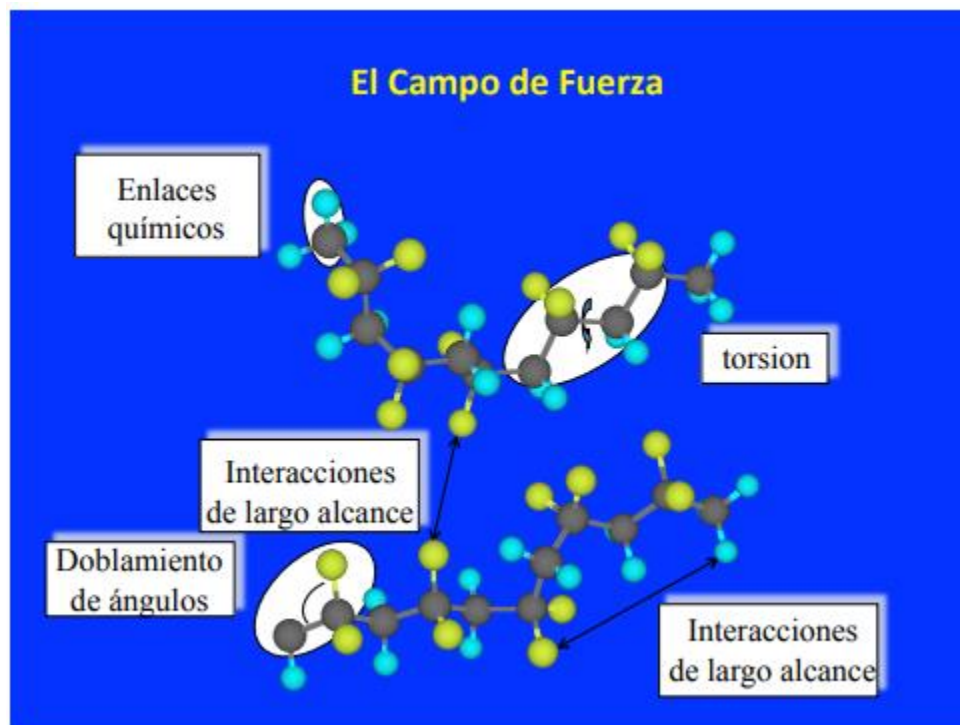
Condiciones para algunos parámetros que no se presenta explícitamente

El campo de fuerza CLAYFF, conforma varios tipos de interacciones 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 condensada 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.*Parámetros no adherentes para el campo de fuerza CLAYFF*

Especie	Simbolo	Carga (<i>e</i>)	D_0 (Kcal/Kmol)	R_0 (Å)
Hidrogeno de agua	h*	0,4100		
Hidrogeno de Hidroxilo	ho	0,425	0	0
Oxigeno de agua	o*	-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	ao	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

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:

$$F_i = - \sum \frac{dV(r_{ij})}{dr_{ij}}$$

Siendo F_i la fuerza total ejercida sobre la partícula i , $V_{(ij)}$ es el potencial que representa las interacciones del conjunto de estudio y r_{ij} 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 isoterma-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 físicas (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 de las nanopartículas*

Clasificación			Descripción
Según procedencia	su	Natural	Son todas las nanopartículas que se pueden encontrar de forma natural en la naturaleza, un ejemplo sería las nanopartículas producidas en las erupciones volcánicas o espumas marinas.
		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 naturaleza química	su	Orgánicos	Son las nanopartículas basadas en carbono como el grafeno, el fullereno, nanotubos de carbono, coloides orgánicos, 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 dimensiones		Tri dimensional	Los electrones no están confinados y pueden moverse libremente.
		Bi dimensional	Los electrones están confinados únicamente en una dirección.
		Unidimensional dimensional	Lo electrones están confinados en dos dimensiones
		cero dimensional	Los electrones están confinados en las tres dimensiones

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

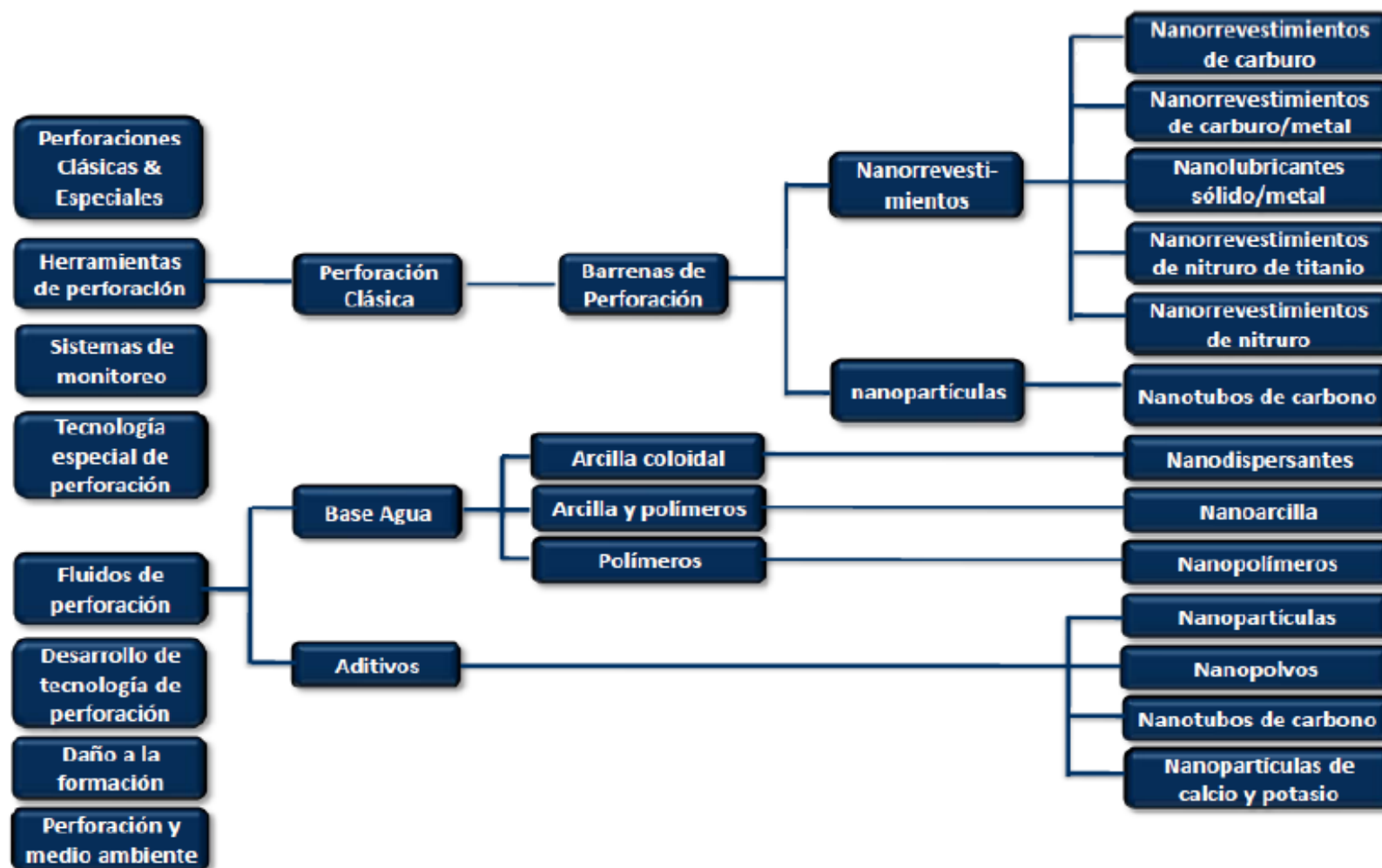
4.1.2 Nanopartículas aplicadas en los fluidos de perforación

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 líquida, 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 Investment 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, óxido de magnesio, óxido de níquel, óxido de hierro, óxido de zinc, óxido 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 líquida 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.*Nanopartículas en lodos de perforación*

Nombre	Formula química	Características	Aplicaciones
Oxido de Titanio	TiO ₂	Aumento de la viscosidad plástica.	
		Reducción del punto de fluencia al aumentar la concentración.	
		Reducción de la pérdida de líquido y espesor de la retorta.	Mejoramiento de las propiedades
		Estructura cristalina, amorfa y semicristalinas.	reológicas de los fluidos de
		Mejoramiento de la movilidad de las partículas.	perforación a base de agua
		Diferentes comportamientos en ciertas temperaturas.	
Óxido de zinc	ZnO	Mejoramiento de las propiedades de conductividad térmica y eléctrica.	
		Reducción significativa de la pérdida de filtrado en condiciones de baja presión y temperatura.	Mejoramiento de las propiedades
		Reducción en el esfuerzo de corte	reológicas de los fluidos de
		Mantiene suspensión estable.	perforación a base de
		Según resultados de pruebas de sedimentación las partículas son estables en la precipitación.	agua
Oxido de cobre	CuO	Podrían considerarse un aditivo para fluidos de perforación más respetuoso con el medio ambiente.	Mejoramiento de las
		Presenta buena consistencia a temperaturas altas en los fluidos.	propiedades
		Maneja una buena conductividad térmica	reológicas de los fluidos de
		Mejoramiento de la estabilidad térmica a temperaturas relativamente altas.	perforación a base de
			agua

		reducción de la viscosidad del petróleo pesado. Alternancia de humectabilidad.	
Magnetita	Fe_3O_4	Mejora las propiedades Reológicas a temperaturas elevadas. Disminución de la pérdida de líquido en condiciones de HPHT.	Mejoramiento de las propiedades reológicas de los fluidos de perforación a base de agua.
Oxido de Magnesio	MgO	Para lechada de cemento Fracturamiento hidráulico Disminución de la pérdida de fluidos Aumento del límite elástico Se requiere más investigación reológica para evaluar sus capacidades Aumentando concentración, el PH se mantiene constante Afectan negativamente la pérdida de liquido	Mejoramiento de las propiedades reológicas de los fluidos de perforación a base de agua
Óxido de hierro	Fe_2O_3	Mejoramiento en las características de filtración Aumento del punto de fluencia Aumento viscosidad plástica Reducción fuerza de arrastre Mejora las propiedades del filtrado sin tener ningún efecto sobre las propiedades reológicas en el fluido a base de aceite Mejoramiento en el límite elástico	Mejoramiento de las propiedades reológicas de los fluidos de perforación a base de agua
Oxido de Aluminio	Al_2O_3	Incremento de la conductividad térmica Aumento en el límite elástico Aumento en la resistencia de gel Reducción en el volumen del filtrado Al aumentar la concentración, el PH se	Mejoramiento de las propiedades reológicas de los fluidos de perforación a base de

		reduce ligeramente	agua
Oxido de SiO ₂	Sílice	Debido a su química establecida que se 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 de estas pruebas arrojaron una reducción de pérdida del 70% comparada con 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 $1,3 \text{ g/cm}^3$, 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.

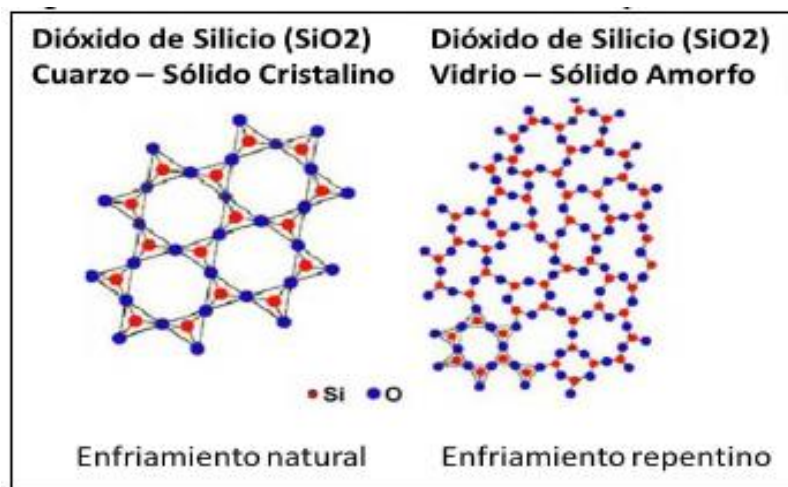
Los Nanofluidos son dispersiones coloidales estables y en la ingeniería de petróleos y en la industria como tal se han hecho pruebas a nivel laboratorio para la mejorara de los lodos de perforación en aspectos como la disminución en la perdida de filtrado, disminución de la torta; la Nanosílice es un 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 (SiO_2), el cual se encuentra en diferentes formas: amorfo o cristalino figura (8), porosos y no porosos, anhídrido 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.

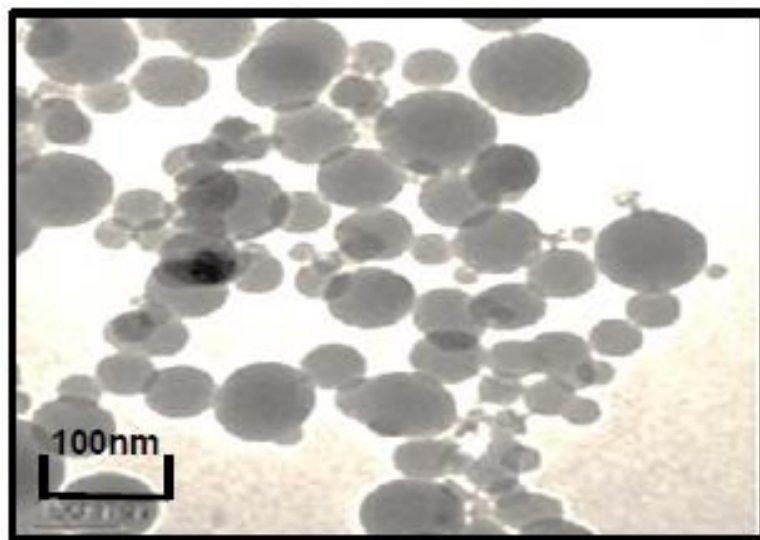
Estado del dióxido de Silicio.



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 pérdida 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 pérdida de fluido de circulación de un 17- 27%”.

En 2011, Javeri et al, se realizaron estudios para prevenir la pérdida 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 sólidos 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 amoníaco.

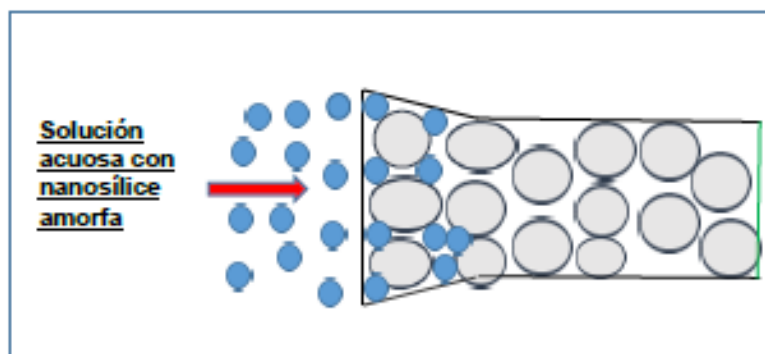
Las reacciones de condensación empiezan antes de que la hidrólisis se complete. Se utilizan alcoholes como medio de reacción debido a la inmiscibilidad de los alcoxilatos y el agua, siendo necesario un disolvente común a ambos como agente homogenizante.

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



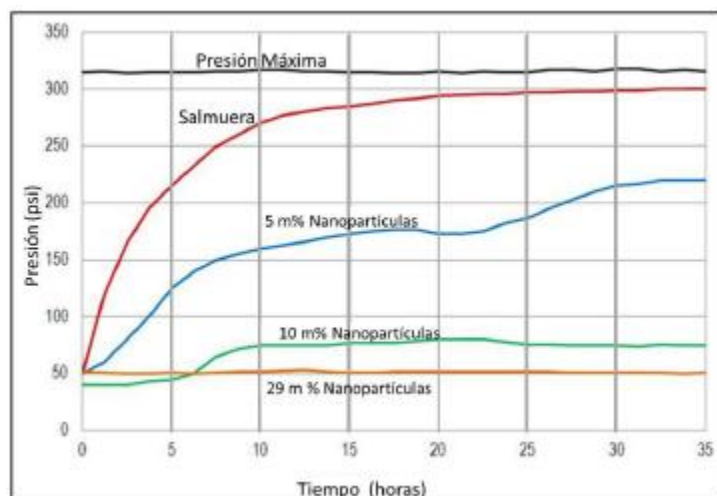
Nota: Adaptado de Nanopartículas de Sílice en los poros de la formación.

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 arrojó un resultado de una disminución del 98.9% de la permeabilidad, debido a que las nanopartículas hicieron sello en las fracturas de 10 – 50 μm 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 Nano-particle Fluid. En: SPE Oil and Gas 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 líquida 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 tóxicas, 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 (Al_2O_3), Óxido de Níquel (NiO), 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:

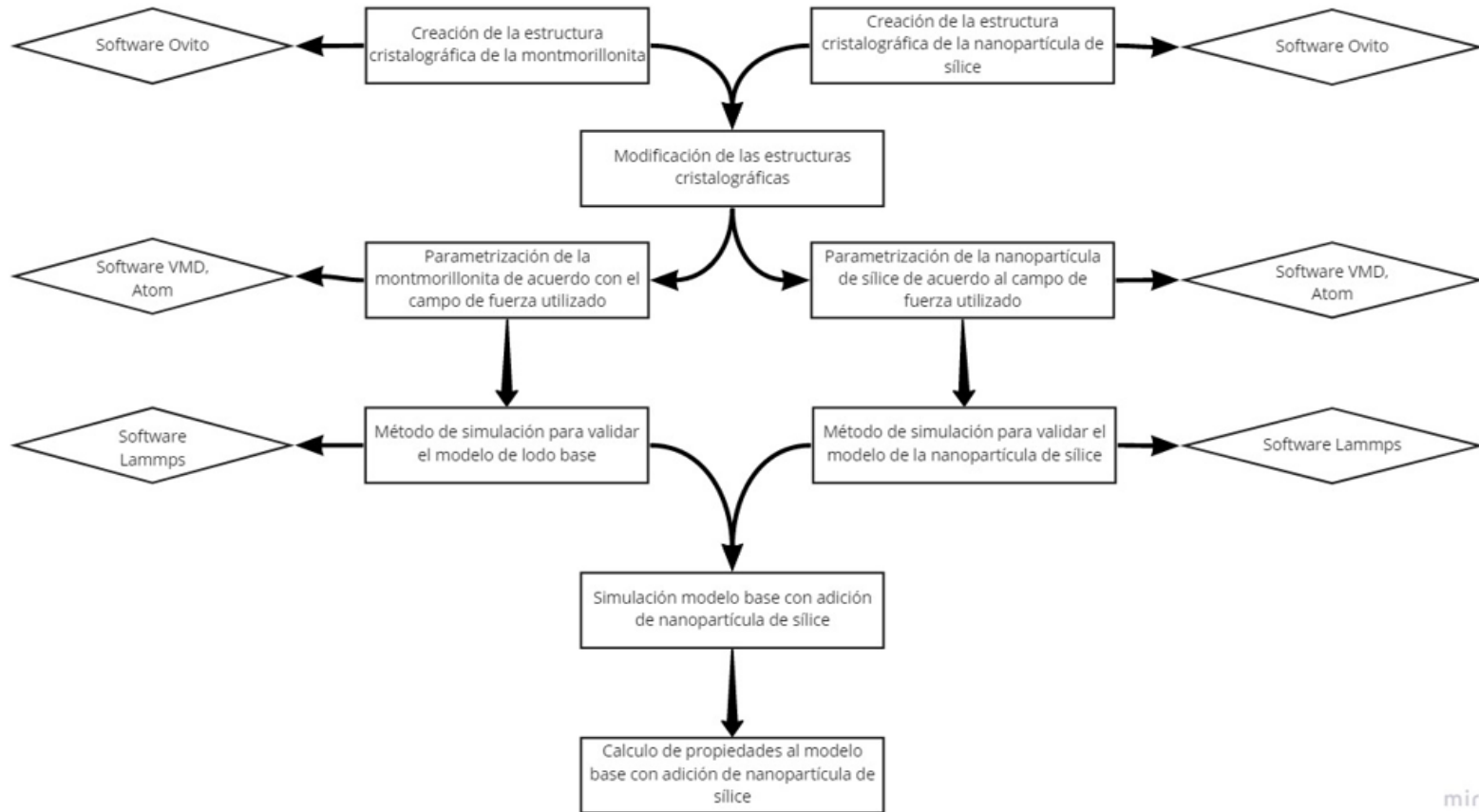
El Óxido de Silicio hidrófobo (SiO_2 (S)) no puede ser dispersado en agua destilada y salmuera porque necesita un solvente orgánico por su naturaleza hidrófoba. Tiene la propiedad de modificar la mojabilidad de la roca y disminuye la tensión interfacial entre el agua y el aceite aumentando el recobro de aceite residual.

Óxido de Silicio tratado con sileno (SiO_2 (S)), se debe dispersar en salmuera para incrementar el factor de recobro.

6. Metodología

Figura 12.

Metodología de Simulación.



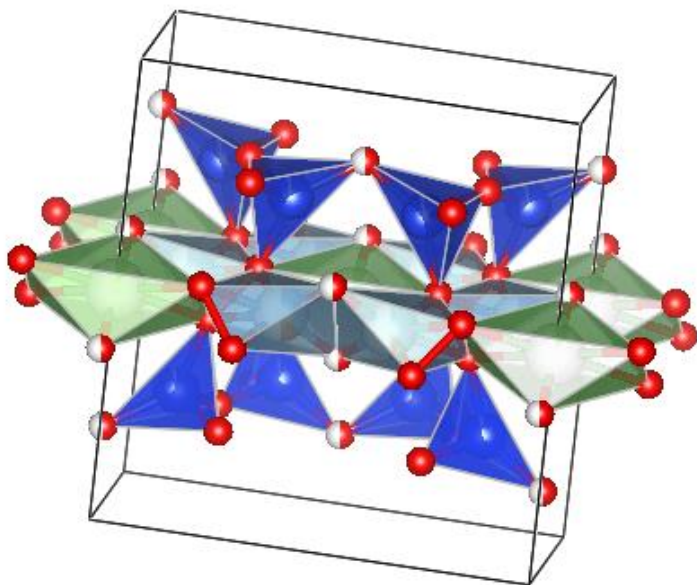
6.1 Estructura cristalográfica de la montmorillonita

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 artículo 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.

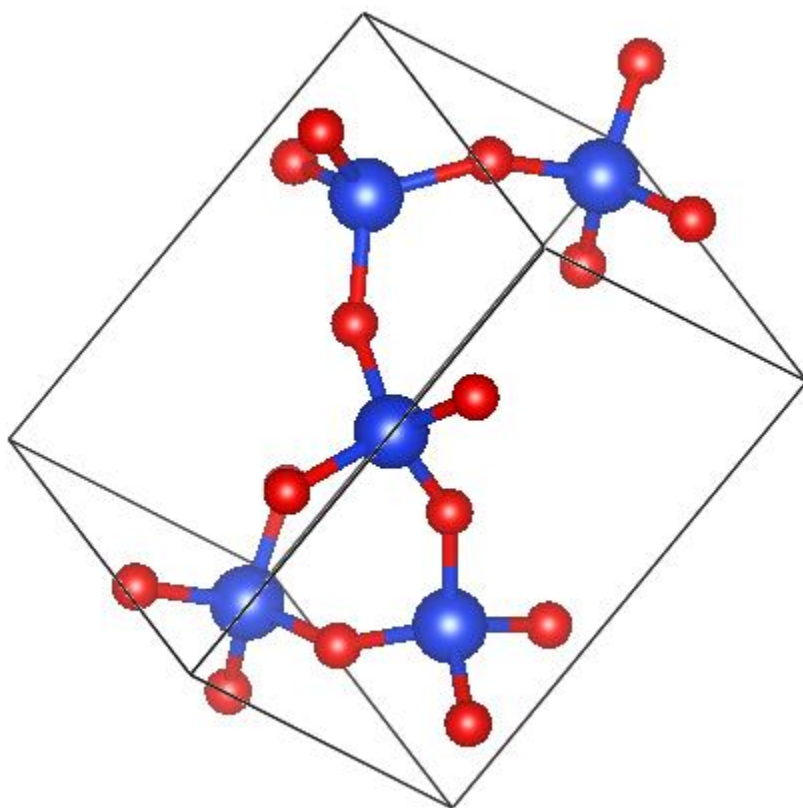


Nota: Propia software OVITO

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 transcurso 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 artículo SPE 146979 “Decreasing water invasion into Atoka shale using Nonmodified Silica Nanoparticles” by J. Cai, SPE

Figura 14.*Estructura Cristalográfica Sílice.*

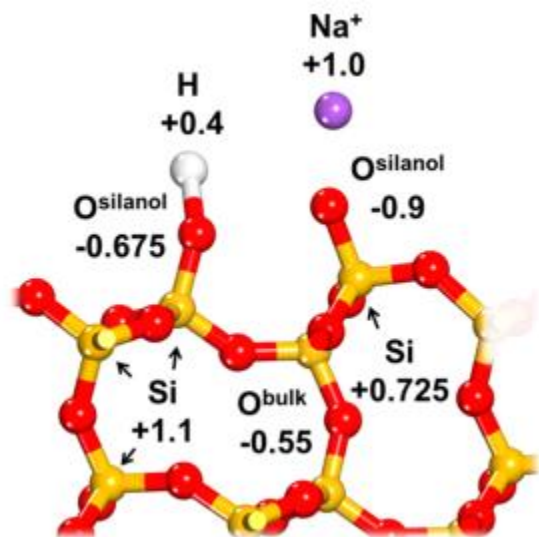
Nota: Propia software Vesta

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 lammmps es necesario la creación del archivo de entrada de acuerdo con los parámetros requeridos en lammmps 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 lammmps.

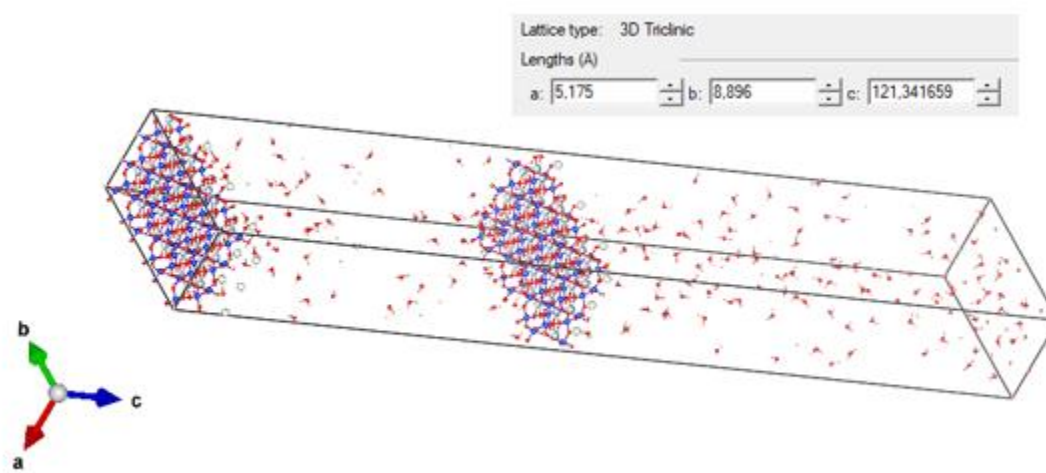
6.5 Método de simulación para validar el modelo de lodo base

Para la validación del modelo base se inició con el proceso de una caja de simulación con dimensiones $a = 5,175(\text{\AA})$; $b = 8,896(\text{\AA})$; $c = 121,34(\text{\AA})$, 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 lammmps 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, OCFE 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 lammmps; estos parámetros se especifican en la tabla (5).

Tabla 5.

Parámetros adheridos para la nanosílice.

tipo	angulo $E_{\theta} = K_{\theta}(\theta_{ij} - \theta_{0,ij})$ $K_{\theta}(\text{kcal/mol rad})$	θ_0 (°)
O-Si-O	100	109,5
Si-O-Si	100	149
Si-O-H	50	115
tipo	enlace $E_r = K_r(r_{ij} - r_{0,ij})$ $K_r (\text{kcal/mol Å}^2)$	$r_{0,ij}$ (Å)
Si-O	285	1.68, 1.65
O-H	495	0,945

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

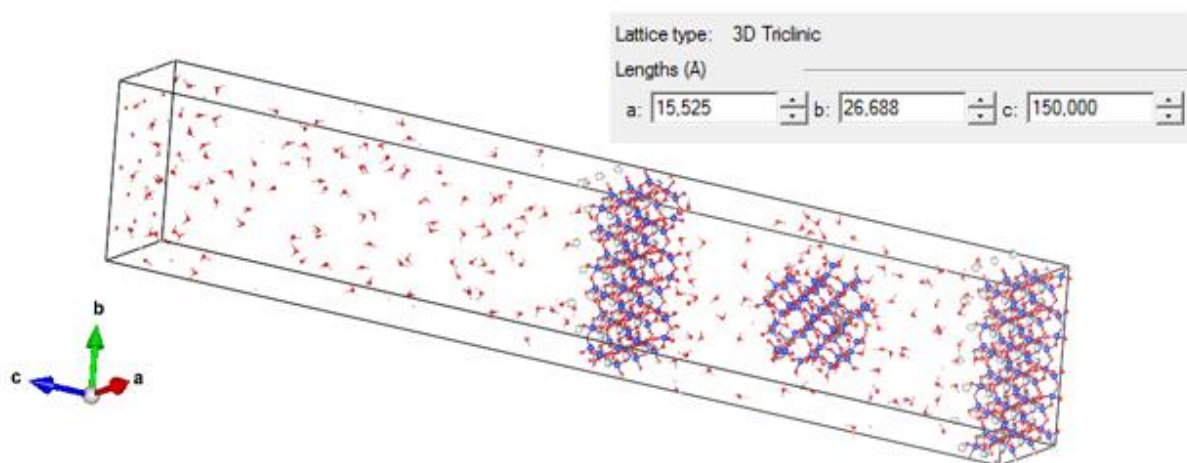
Para la validación de la nanopartícula de sílice se toman las coordenadas reportadas en el archivo generado por el software VESTA, seguido a esto se crea un input de entrada a lammmps donde se corre la minimización y el equilibrio de la nanopartícula; arrojando resultados de energía, densidad y volumen 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.



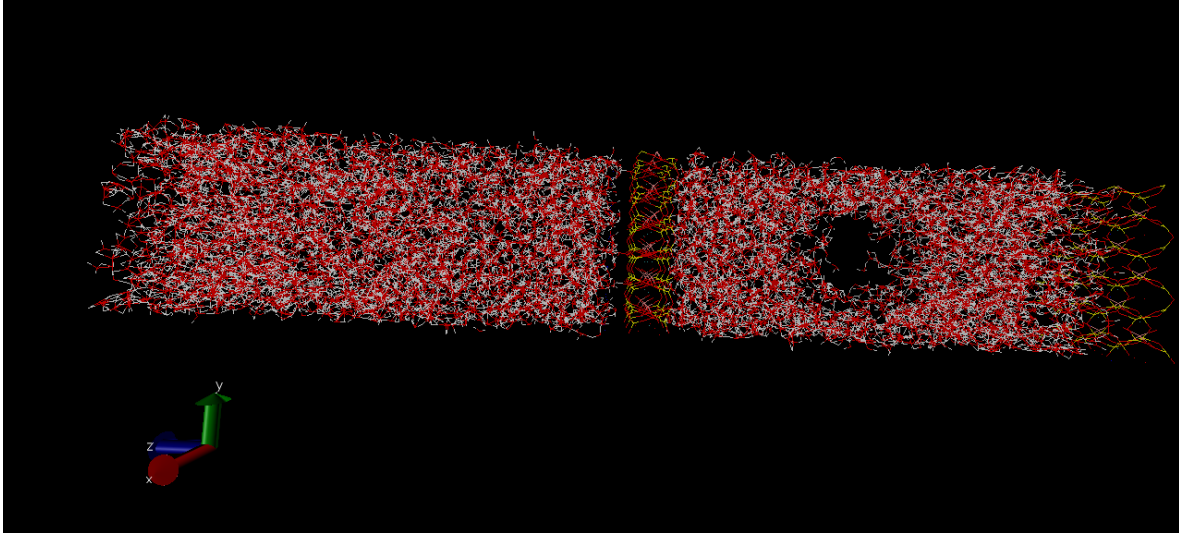
Nota: Propia software Vesta.

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

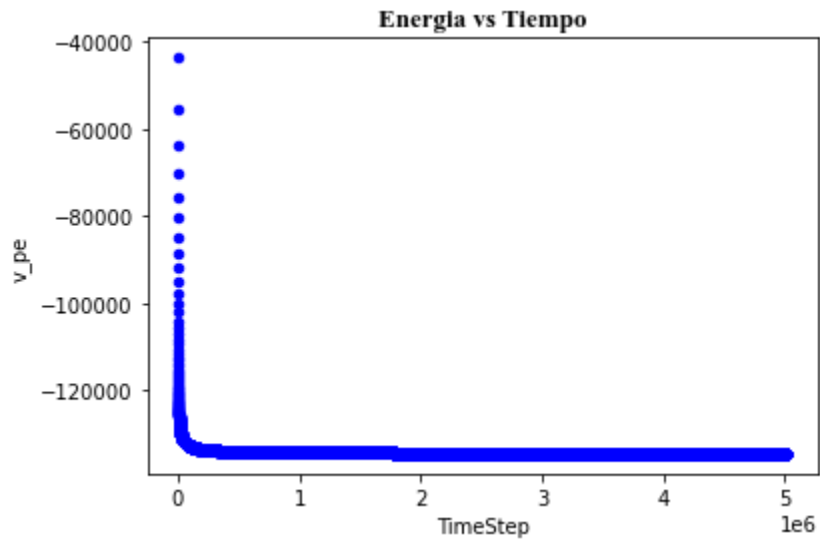
7.1.1 Validación del lodo base

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.

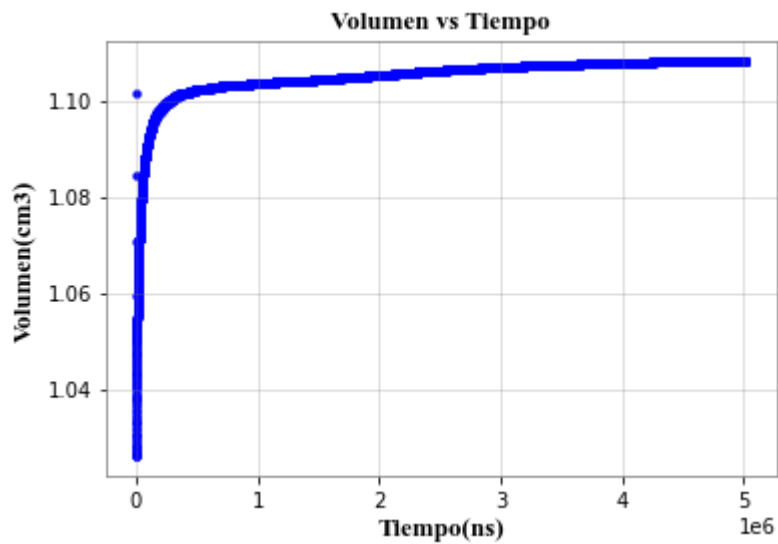
Resultados de la Energía vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python.

Figura 20.

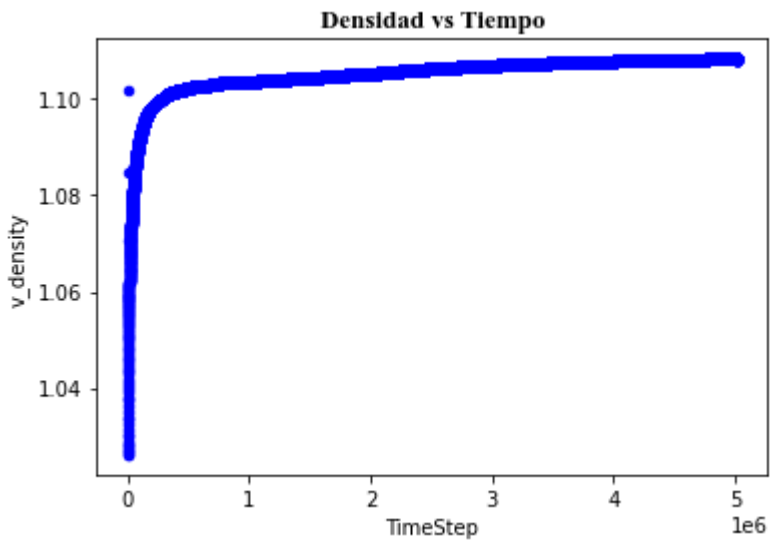
Resultados del Volumen vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python.

Figura 21.

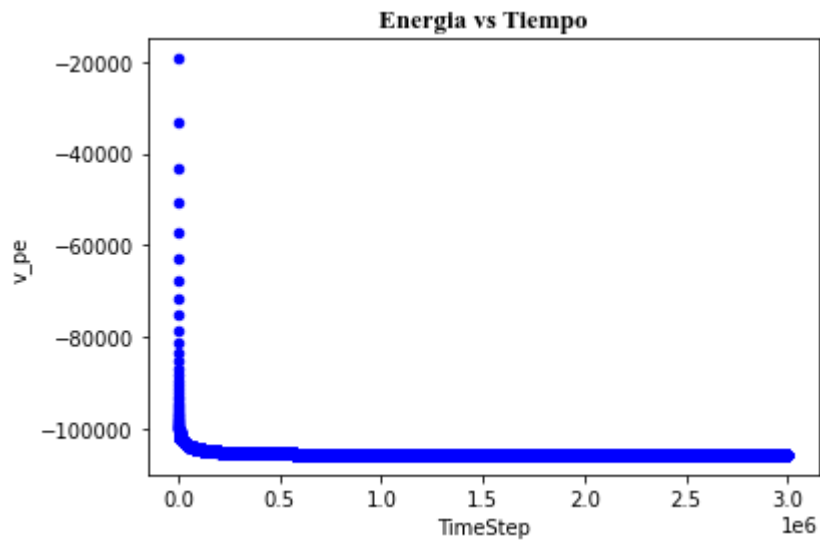
Resultados Densidad vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python.

Figura 22.

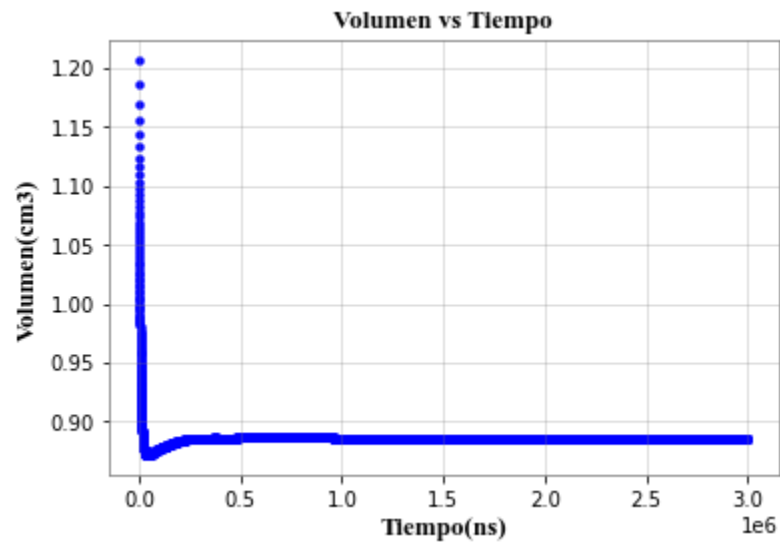
Resultados del Energía vs Tiempo a 500K.



Nota: Propia Python.

Figura 23.

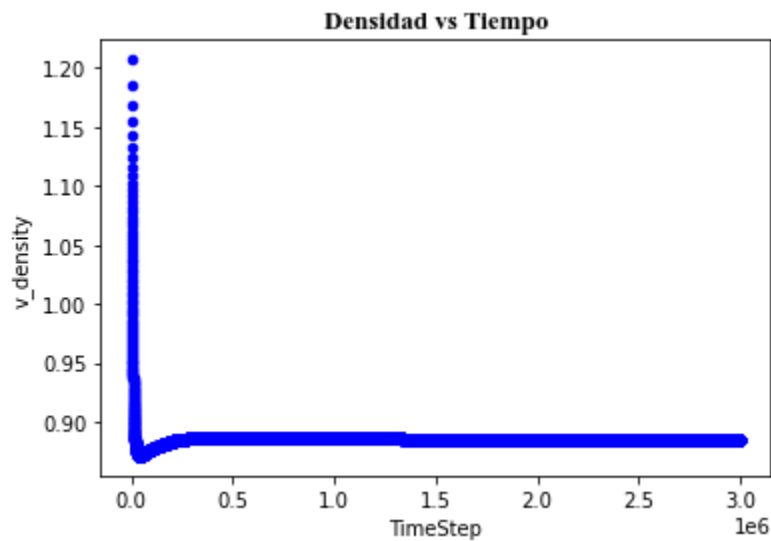
Resultados del Volumen vs Tiempo a 500K.



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 Lammmps 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 (cp)
Lodo Base a 300K	5,00E-06	10.424 $\pm$ 0.2805
	3,75E-06	11.023 $\pm$ 0.2433
	2,50E-06	11.486 $\pm$ 0.2028
	6,25E-06	9.894 $\pm$ 0.2744
	1,26E-06	12.195 $\pm$ 0.1989

Tabla 7.

Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 500K.

	Amplitud (ns/ps^{-2})	Viscosidad (cp)
Lodo Base a 500K	5,00E-06	10.923 $\pm$ 0.2723
	3,75E-06	11.307 $\pm$ 0.2545
	2,50E-06	10.933 $\pm$ 0.1924
	6,25E-06	9.638 $\pm$ 0.2621
	1,26E-06	11.398 $\pm$ 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 arroja un valor de densidad de $1,09 \text{ g/cm}^3$; 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 Experimentales	Rangos Simulados a 300K	Rangos Simulados a 500K
densidad (lb/gal)	8.5 - 10	9,0965	7,704
Viscosidad Aparente (cp)	11 - 21.5	11.023 $\pm$ 0.2433 11.486 $\pm$ 0.2028 12.195 $\pm$ 0.1989	11.307 $\pm$ 0.2545 11.398 $\pm$ 0.1993

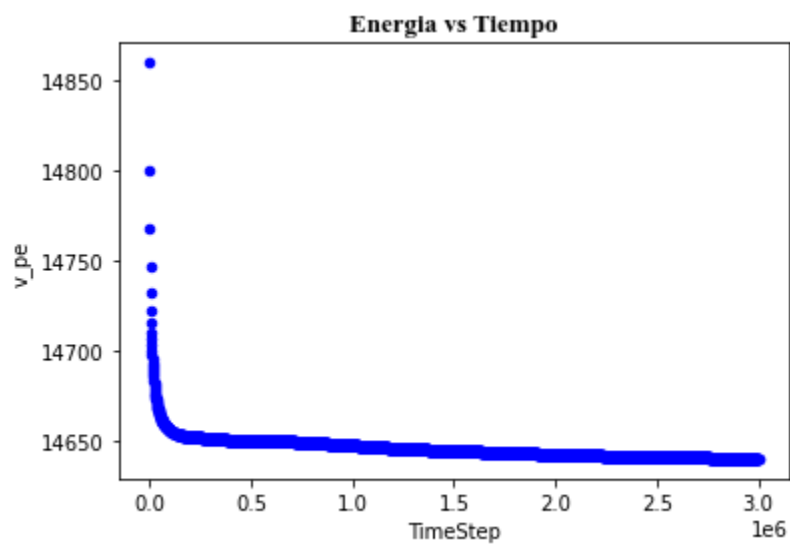
7.1.2 Validación de la nanopartícula de sílice

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.

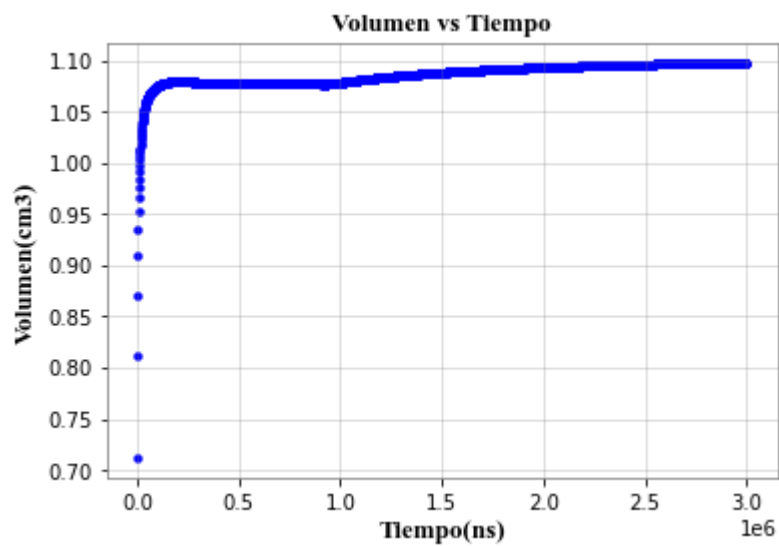
Resultados de Energía vs Tiempo.



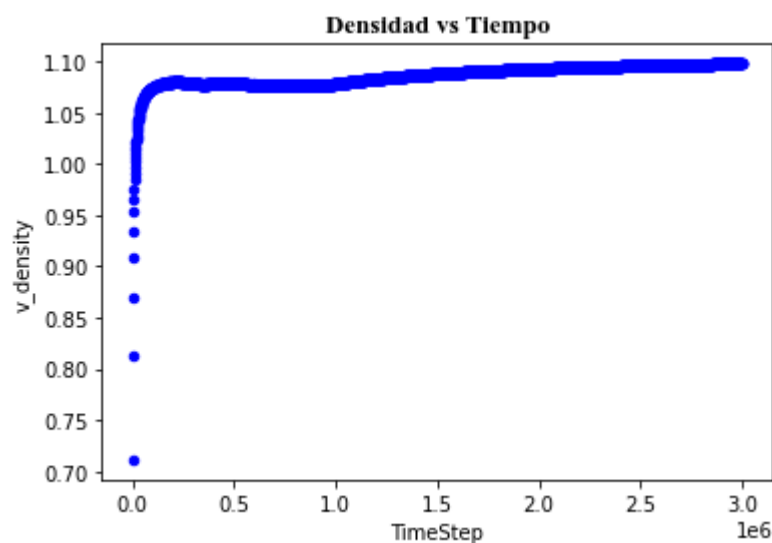
Nota: Propia Python.

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.

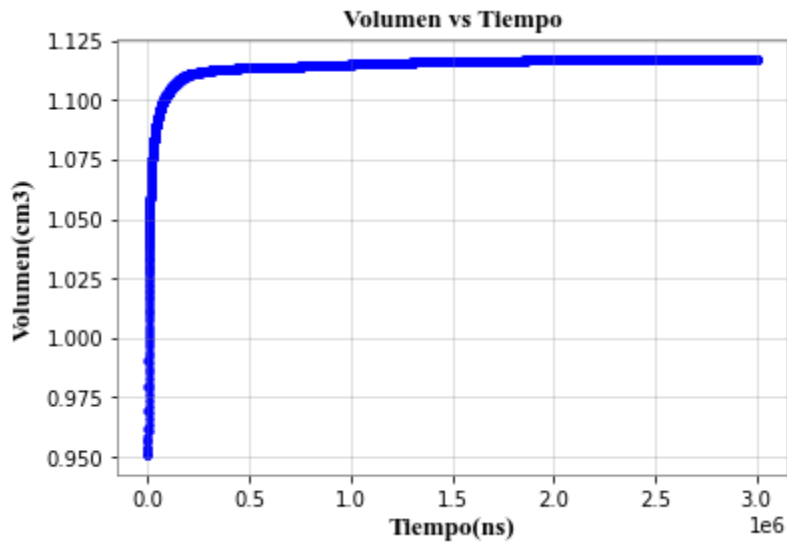
En la figura (29, 32), se puede observar una disminución de energía, debido a la inestabilidad de los átomos en los primeros pasos de tiempo hasta lograr el equilibrio. Posteriormente se presentan los resultados de volumen figura (27) y densidad figura (28) de la validación de la estructura del lodo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

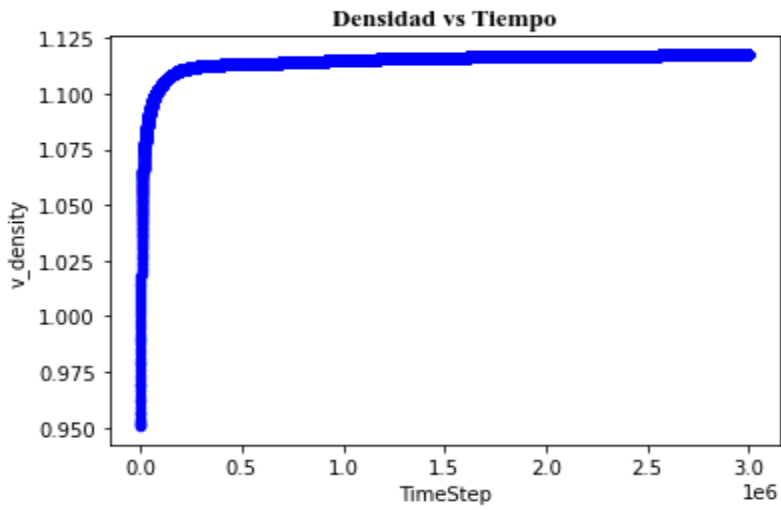
Resultados de la Volumen vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python

Figura 29.

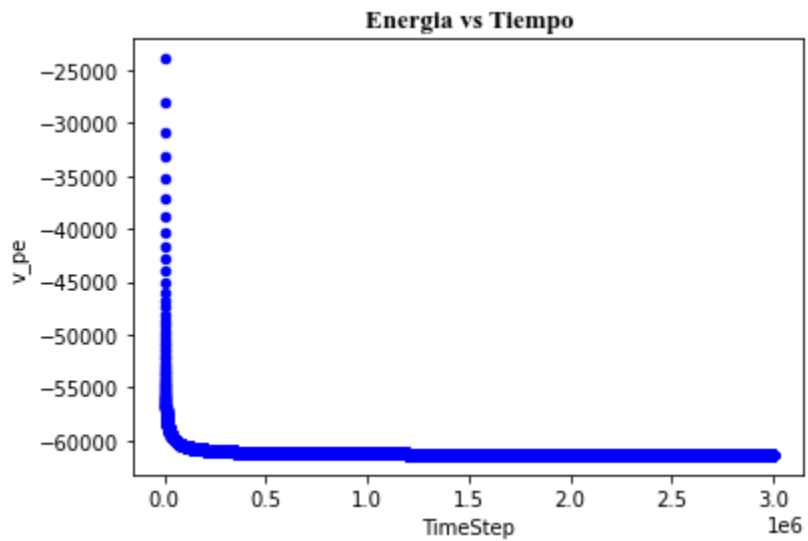
Resultados de la Densidad vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python

Figura 30.

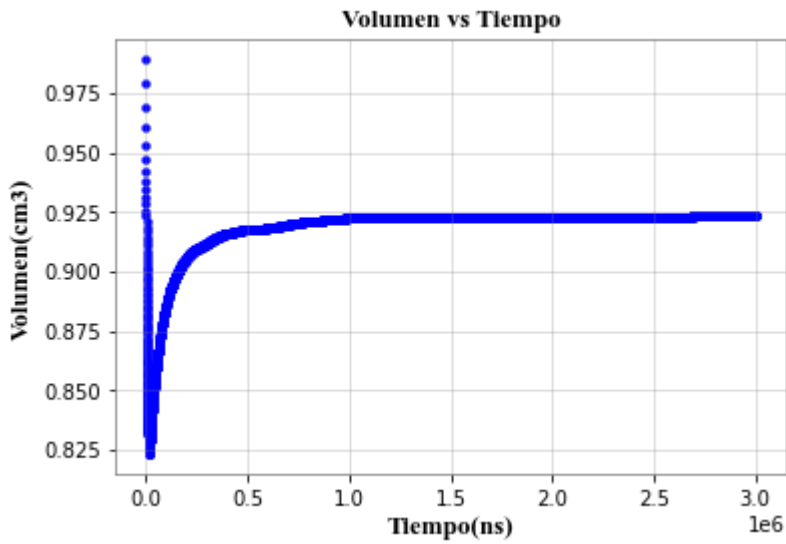
Resultados de la Energía vs Tiempo a 300K.



Nota: Propia Python

Figura 31.

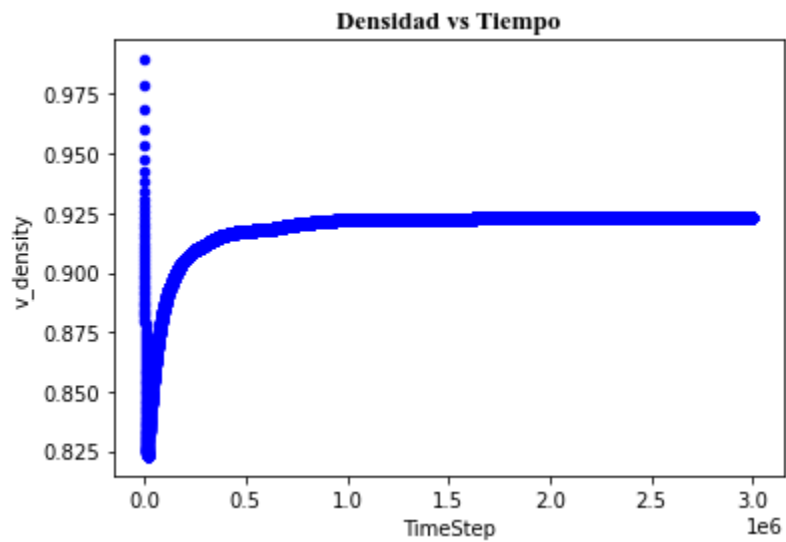
Resultados de la Volumen vs Tiempo a 500K.



Nota: Propia Python

Figura 32.

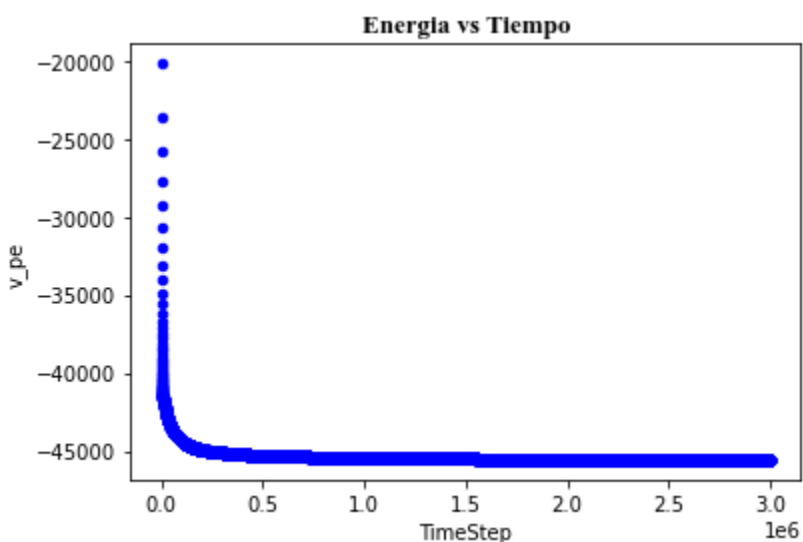
Resultados de la Densidad vs Tiempo a 500K.



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)
LODO BASE + NANOSILICE A 300K.	5,00E-06	14.509 $\pm$ 0.3366
	3,75E-06	15.096 $\pm$ 0.3057
	2,50E-06	15,701 $\pm$ 0.3230
	6,25E-06	14.004 $\pm$ 0.3472
	1,25E-06	16.362 $\pm$ 0.3087

Tabla 10.*Resultados de Viscosidad para cada amplitud a 500K.*

	Amplitud (ns/ps^{-2})	Viscosidad (cp)
LODO BASE + NANOSILICE A 500K.	5,00E-06	13.775 $\pm$ 0.3365
	3,75E-06	14.270 $\pm$ 0.3148
	2,50E-06	14.6507 $\pm$ 0.2976
	6,25E-06	13.200 $\pm$ 0.3411
	1,25E-06	15.132 $\pm$ 0.2802

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 arroja valores de densidad de $1,1174 \text{ g/cm}^3$ a 300K y $0,9231 \text{ g/cm}^3$ 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).

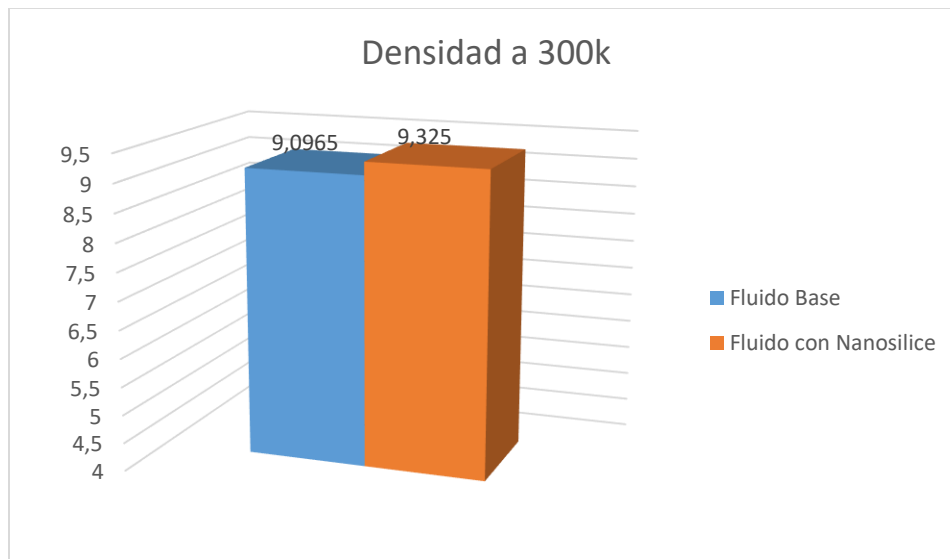
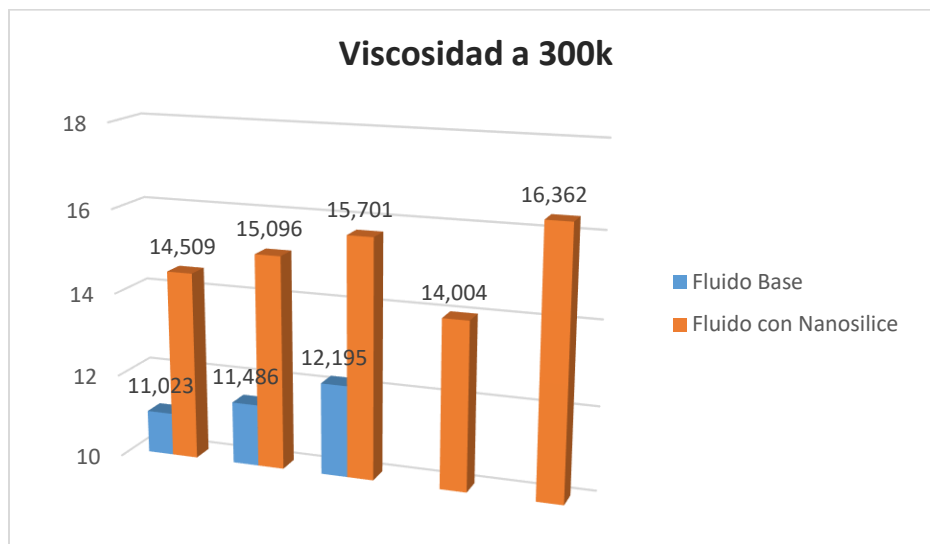
Tabla 11.*Resultados de Viscosidad y Densidad experimentales y simulados a 300K y 500K.*

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

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.

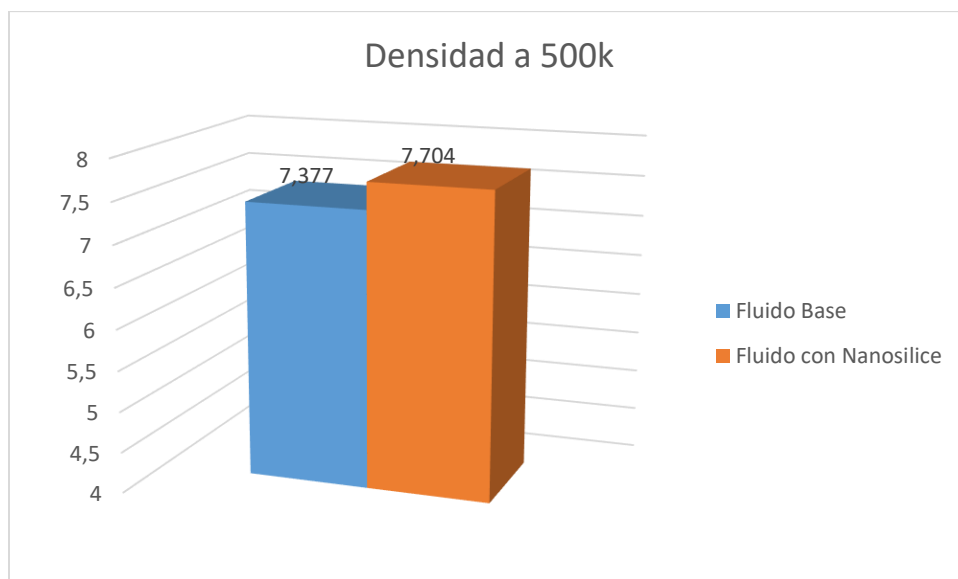
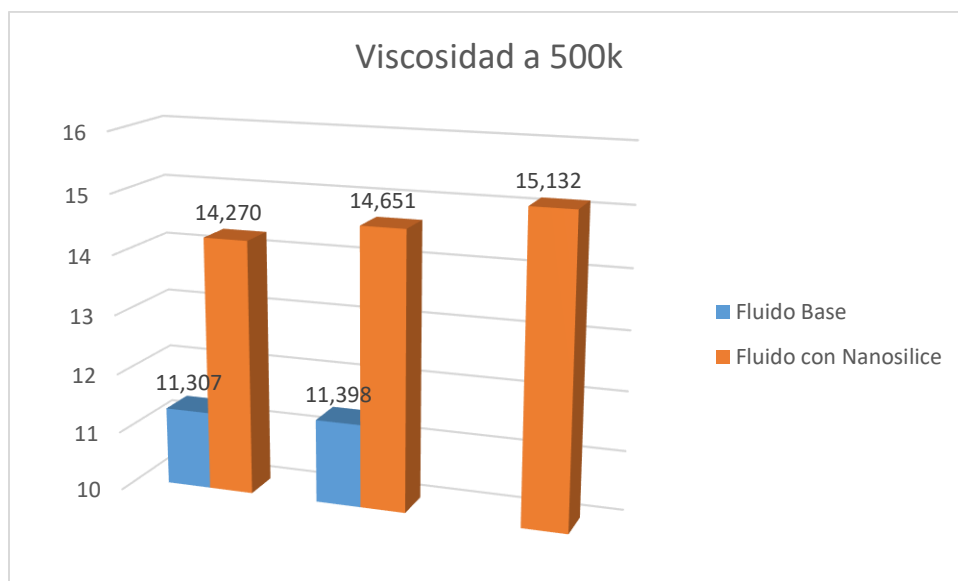


Figura 37.

Comparación de Viscosidad a 500K.



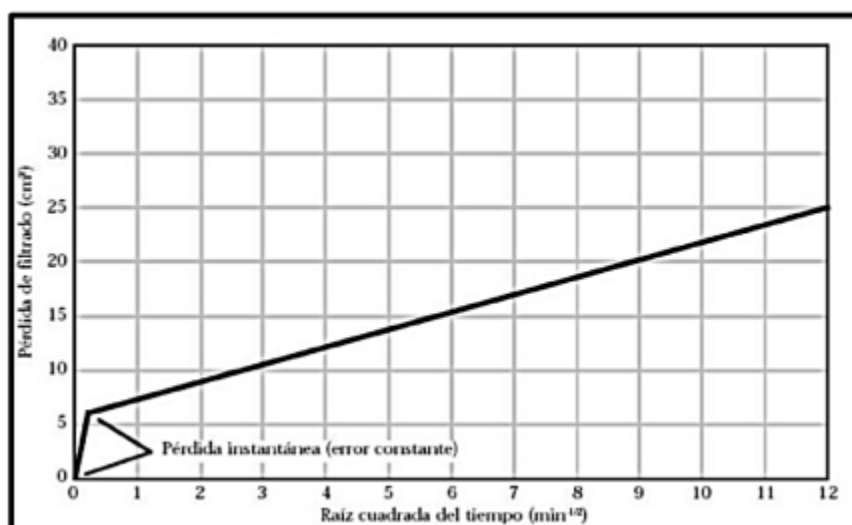
Basados en estudios previos Henry Elogukwu, Raoof Gholami, Sharul Sham Dol en el paper denominado "An approach to improve the cuttings carrying capacity of nanosilica based muds", Stefania Betancur Márquez en su proyecto de investigación de la universidad Nacional de Colombia sede Medellín denominado "Mejoramiento de los fluidos de perforación usando nanopartículas funcionalizadas: reducción de las pérdidas de filtrado y del espesor de la retorta" 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 específicas 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.



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

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.

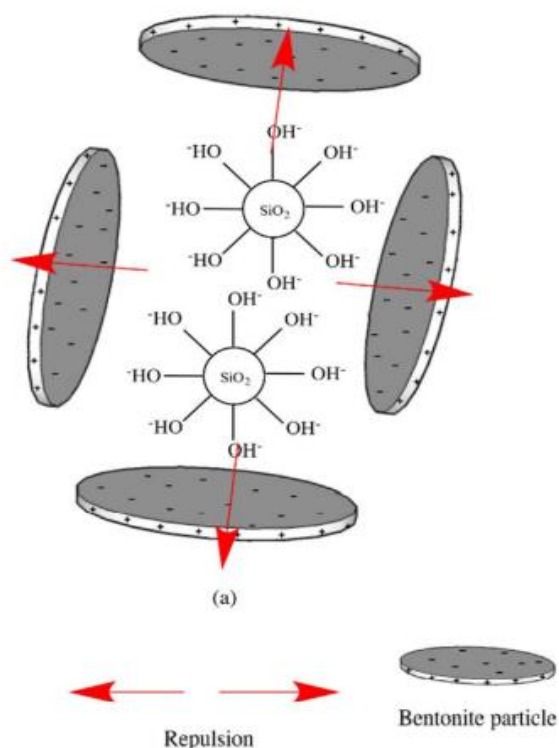
Por otra parte, el estudio de las nanopartículas de sílice para la formulación de lodos de perforación se ha venido estudiando durante los últimos años, donde se ha notado la mejora en el filtrado de lodo (Amanullah y Al-Tahini, 2009; Amanullah et al., 2011; Srivatsa y Ziaja, 2012; Zakaria et al., 2012; 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

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, pérdidas 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: educación 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 force field targeting improved sampling of the backbone ϕ , ψ and side-chain χ_1 and
- Bizmark N, Ioannidis MA (2015). Effects of ionic strength on the colloidal stability and interfacial assembly of hydrophobic ethyl cellulose 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-MoS₂ 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 drilling 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
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
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

Bonds

1	1	32	80
2	1	34	77
3	1	36	79
4	1	38	78
5	1	70	83
6	1	72	82
7	1	74	84
8	1	76	81
9	2	85	86
10	2	88	89
11	2	91	92
12	2	94	95
13	2	97	98
14	2	100	101
15	2	103	104
16	2	106	107
17	2	109	110
18	2	112	113
19	2	115	116
20	2	118	119
21	2	121	122
22	2	124	125
23	2	127	128
24	2	130	131
25	2	133	134
26	2	136	137
27	2	139	140
28	2	142	143
29	2	145	146
30	2	148	149
31	2	151	152
32	2	154	155
33	2	157	158
34	2	160	161

Angles

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

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 85.103996 # Hw
 267 1 3 0.000000 -0.018000 0.683000 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 8.084000 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 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					
16	2	106	107	1	1	86	85	87
17	2	109	110	2	1	89	88	90
18	2	112	113	3	1	92	91	93
19	2	115	116	4	1	95	94	96
20	2	118	119	5	1	98	97	99
21	2	121	122	6	1	101	100	102
22	2	124	125	7	1	104	103	105
23	2	127	128	8	1	107	106	108
24	2	130	131	9	1	110	109	111
25	2	133	134	10	1	113	112	114
26	2	136	137	11	1	116	115	117
27	2	139	140	12	1	119	118	120
28	2	142	143	13	1	122	121	123
29	2	145	146	14	1	125	124	126
30	2	148	149	15	1	128	127	129
31	2	151	152	16	1	131	130	132
32	2	154	155	17	1	134	133	135
33	2	157	158	18	1	137	136	138
34	2	160	161	19	1	140	139	141
35	2	163	164	20	1	143	142	144
36	2	166	167	21	1	146	145	147
37	2	169	170	22	1	149	148	150
38	2	172	173	23	1	152	151	153
39	2	175	176	24	1	155	154	156
40	2	178	179	25	1	158	157	159
41	2	181	182	26	1	161	160	162
42	2	184	185	27	1	164	163	165
43	2	187	188	28	1	167	166	168
44	2	190	191	29	1	170	169	171
45	2	193	194	30	1	173	172	174
46	2	196	197	31	1	176	175	177
47	2	199	200	32	1	179	178	180
48	2	202	203	33	1	182	181	183
49	2	205	206	34	1	185	184	186
50	2	208	209	35	1	188	187	189
51	2	211	212	36	1	191	190	192
52	2	214	215	37	1	194	193	195
53	2	217	218	38	1	197	196	198
54	2	220	221	39	1	200	199	201
55	2	223	224	40	1	203	202	204
56	2	226	227	41	1	206	205	207
57	2	229	230	42	1	209	208	210
58	2	232	233	43	1	212	211	213
59	2	235	236	44	1	215	214	216
60	2	238	239	45	1	218	217	219
--	-	---	---	46	1	221	220	222

```
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

1	1	10	0.000000	4.309000	1.450000	0.589000	# Si	66	1	1	0.000000	3.254000	7.903000	61.488998	# Al
2	1	6	0.000000	0.568000	2.010000	0.012000	# Ob	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
10	1	10	0.000000	4.565000	5.898000	5.277000	# Si	75	1	6	0.000000	1.625000	4.487000	64.421997	# Ob
11	1	6	0.000000	3.131000	6.458000	5.854000	# Ob	76	1	7	0.000000	-0.228000	4.487000	62.875000	# Oh
12	1	8	0.000000	4.559000	6.361000	3.706000	# Oo	77	1	2	0.000000	4.037000	4.448000	0.546000	# Ho
13	1	10	0.000000	1.977000	7.446000	5.277000	# Si	78	1	2	0.000000	2.249000	4.448000	5.320000	# Ho
14	1	6	0.000000	0.544000	6.886000	5.854000	# Ob	79	1	2	0.000000	3.837000	0.000000	4.320000	# Ho
15	1	8	0.000000	1.971000	6.983000	3.706000	# Oo	80	1	2	0.000000	2.450000	0.000000	1.546000	# Ho
16	1	10	0.000000	4.565000	2.998000	5.277000	# Si	81	1	2	0.000000	-0.228000	4.487000	61.875000	# Ho
17	1	6	0.000000	3.131000	2.438000	5.854000	# Ob	82	1	2	0.000000	1.560000	4.487000	59.102001	# Ho
18	1	8	0.000000	4.559000	2.535000	3.706000	# Oo	83	1	2	0.000000	3.148000	0.039000	60.102001	# Ho
19	1	10	0.000000	4.309000	7.446000	0.589000	# Si	84	1	2	0.000000	1.360000	0.039000	62.875000	# Ho
20	1	6	0.000000	0.568000	6.886000	0.012000	# Ob	85	1	9	0.000000	0.009000	0.892000	12.292000	# Ow
21	1	8	0.000000	4.316000	6.983000	2.160000	# Oo	86	1	3	0.000000	0.602000	0.861000	11.354000	# Hw
22	1	10	0.000000	1.722000	2.998000	0.589000	# Si	87	1	3	0.000000	0.063000	1.911000	12.730000	# Hw
23	1	6	0.000000	3.156000	2.438000	0.012000	# Ob	88	1	9	0.000000	1.336000	3.032000	67.982002	# Ow
24	1	8	0.000000	1.728000	2.535000	2.160000	# Oo	89	1	3	0.000000	1.187000	2.588000	66.974998	# Hw
25	1	5	0.000000	-0.381000	4.487000	67.625000	# Na	90	1	3	0.000000	0.756000	2.453000	68.731003	# Hw
26	1	5	0.000000	2.206000	0.039000	67.625000	# Na	91	1	9	0.000000	4.432000	3.098000	8.447000	# Ow
27	1	1	0.000000	3.143000	3.416000	2.933000	# Al	92	1	3	0.000000	5.494000	3.418000	8.386000	# Hw
28	1	1	0.000000	0.556000	7.864000	2.933000	# Al	93	1	3	0.000000	4.093000	3.141000	9.503000	# Hw
29	1	4	0.000000	3.143000	5.480000	2.933000	# Mg	94	1	9	0.000000	5.011000	6.226000	77.633003	# Ow
30	1	4	0.000000	0.556000	1.032000	2.933000	# Mg	95	1	3	0.000000	5.804000	6.948000	77.349998	# Hw
31	1	6	0.000000	4.772000	0.000000	0.000000	# Ob	96	1	3	0.000000	4.376000	6.007000	76.749001	# Hw
32	1	7	0.000000	1.450000	0.000000	1.546000	# Oh								
33	1	6	0.000000	2.185000	4.448000	0.000000	# Ob								

Angles

1	1	86	85	87
2	1	89	88	90
3	1	92	91	93
4	1	95	94	96
5	1	98	97	99
6	1	101	100	102
7	1	104	103	105
8	1	107	106	108
9	1	110	109	111
10	1	113	112	114
11	1	116	115	117
12	1	119	118	120
13	1	122	121	123
14	1	125	124	126
15	1	128	127	129
16	1	131	130	132
17	1	134	133	135
18	1	137	136	138
19	1	140	139	141
20	1	143	142	144
21	1	146	145	147
22	1	149	148	150
23	1	152	151	153
24	1	155	154	156
25	1	158	157	159
26	1	161	160	162
27	1	164	163	165
28	1	167	166	168
29	1	170	169	171
30	1	173	172	174
31	1	176	175	177
32	1	179	178	180
33	1	182	181	183
34	1	185	184	186
35	1	188	187	189

Bonds

1	1	32	80
2	1	34	77
3	1	36	79
4	1	38	78
5	1	70	83
6	1	72	82
7	1	74	84
8	1	76	81
9	2	85	86
10	2	88	89
11	2	91	92
12	2	94	95
13	2	97	98
14	2	100	101
15	2	103	104
16	2	106	107
17	2	109	110
18	2	112	113
19	2	115	116
20	2	118	119
21	2	121	122
22	2	124	125
23	2	127	128
24	2	130	131
25	2	133	134
26	2	136	137
27	2	139	140
28	2	142	143
29	2	145	146
30	2	148	149
31	2	151	152
32	2	154	155

Apéndice B. Topología de la nanosílice.

Pair Coeffs

```

1  0.015 1.085 #Hs
2  0.054 3.47 #Ob
3  0.122 3.47 #Os
4  0.093 4.15 #Si

```

Bond Coeffs

```

1 285 1.68 #Si-Ob
2 495 0.945 #O-H

```

Angle Coeffs # harmonic

```

1 50 115 # Si-O-H
2 100 149.0 # Si-O-Si
3 100 109.5 # O-Si-O

```

LAMMPS data file. CGCMM style.

```

atom_style full generated by VMD/TopoTools v1.8
on Sat Jul 24 19:21:39 -05 2021

```

```

270 atoms

```

```

296 bonds

```

```

434 angles

```

```

0 dihedrals

```

```

0 impropers

```

```

4 atom types

```

```

2 bond types

```

```

3 angle types

```

```

0 dihedral types

```

```

0 improper types

```

```

-0.908638 19.091362 xlo xhi

```

```

-0.256990 19.743010 ylo yhi

```

```

0.413306 20.413306 zlo zhi

```

Masses

```

1 1.0079

```

```

2 15.9994

```

```

3 15.9994

```

```

4 28.0855

```

Atoms # full

1 1 3 0.000000 3.642073 6.085764 4.532562 # Os	194 1 3 0.000000 8.663088 12.836055 17.479797 # Os
2 1 3 0.000000 5.456291 6.302988 2.635313 # Os	195 1 4 0.000000 14.940480 14.940775 10.482333 # Si
3 1 4 0.000000 5.092196 6.719878 4.162977 # Si	196 1 4 0.000000 14.957056 10.843818 14.180174 # Si
4 1 3 0.000000 7.392760 3.742424 5.280581 # Os	197 1 4 0.000000 11.212674 13.941061 14.882308 # Si
5 1 3 0.000000 3.190911 10.082716 3.472056 # Os	198 1 2 0.000000 14.059548 14.622894 11.814638 # Ob
6 1 3 0.000000 3.207487 5.985759 7.169897 # Os	199 1 3 0.000000 14.076121 10.526680 15.511809 # Os
7 1 2 0.000000 6.210127 6.139585 5.195587 # Ob	200 1 2 0.000000 12.245331 14.405670 13.711887 # Ob
8 1 2 0.000000 5.053451 8.343814 4.281816 # Ob	201 1 4 0.000000 13.695453 15.039784 13.342303 # Si
9 1 3 0.000000 5.070027 4.246857 7.979657 # Os	202 1 3 0.000000 15.979441 16.159286 10.762064 # Os
10 1 4 0.000000 7.619043 5.351312 5.381558 # Si	203 1 3 0.000000 15.996017 12.062330 14.459906 # Os
11 1 4 0.000000 4.194398 9.663095 4.683193 # Si	204 1 3 0.000000 11.810744 14.305665 16.349222 # Os
12 1 4 0.000000 4.210974 5.566138 8.381034 # Si	205 1 3 0.000000 14.813384 14.459491 14.374912 # Os
13 1 3 0.000000 10.466487 6.033697 2.314497 # Os	206 1 3 0.000000 13.656709 16.663719 13.461141 # Os
14 1 3 0.000000 10.483060 1.937482 6.011668 # Os	207 1 1 0.000000 3.431993 6.246833 5.610437 # Hs
15 1 2 0.000000 8.652270 5.816472 4.211746 # Ob	208 1 1 0.000000 4.699232 5.584523 2.257608 # Hs
16 1 3 0.000000 8.668846 1.719515 7.909587 # Os	209 1 1 0.000000 7.021325 3.358758 6.254142 # Hs
17 1 2 0.000000 3.314036 9.345766 6.016106 # Ob	210 1 1 0.000000 2.170701 9.703408 3.689199 # Hs
18 1 2 0.000000 3.330609 5.249551 9.713277 # Ob	211 1 1 0.000000 2.187277 5.606452 7.387040 # Hs
19 1 3 0.000000 1.499819 9.128541 7.913355 # Os	212 1 1 0.000000 4.414989 3.351413 8.023306 # Hs
20 1 3 0.000000 1.516395 5.031584 11.611197 # Os	213 1 1 0.000000 9.709428 5.315231 1.936792 # Hs
21 1 4 0.000000 10.102393 6.450587 3.842162 # Si	214 1 1 0.000000 9.725998 1.219759 5.633294 # Hs
22 1 4 0.000000 10.118969 2.353630 7.540003 # Si	215 1 1 0.000000 8.458766 1.880584 8.987463 # Hs
23 1 4 0.000000 2.949942 9.762656 7.543771 # Si	216 1 1 0.000000 1.289739 9.289610 8.991231 # Hs
24 1 4 0.000000 2.966518 5.665699 11.241612 # Si	217 1 1 0.000000 1.306315 5.192653 12.689072 # Hs
25 1 3 0.000000 12.402386 3.472581 4.959156 # Os	218 1 1 0.000000 12.030952 3.088915 5.932718 # Hs
26 1 2 0.000000 5.233359 10.881607 4.962924 # Ob	219 1 1 0.000000 4.895077 2.304027 13.332169 # Hs
27 1 2 0.000000 5.249935 6.784650 8.660765 # Ob	220 1 1 0.000000 7.180327 9.433565 3.367775 # Hs
28 1 3 0.000000 5.266512 2.687693 12.358607 # Os	221 1 1 0.000000 0.044452 8.648677 10.767225 # Hs
29 1 3 0.000000 8.200537 9.812873 3.150632 # Os	222 1 1 0.000000 10.732570 1.210805 9.385912 # Hs
30 1 2 0.000000 8.217113 5.715916 6.848473 # Ob	223 1 1 0.000000 3.712814 13.669150 5.861200 # Hs
31 1 3 0.000000 1.064662 9.027985 10.550082 # Os	224 1 1 0.000000 2.506335 11.675358 8.654487 # Hs
32 1 2 0.000000 11.220323 5.870293 4.874771 # Ob	225 1 1 0.000000 14.442294 6.205841 4.326149 # Hs
33 1 3 0.000000 11.236899 1.773336 8.572613 # Os	
34 1 3 0.000000 10.063648 8.074523 3.961000 # Ob	

Angles

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

Bonds

1 1 1 207
 2 1 1 3
 3 1 2 3
 4 1 2 208
 5 1 3 7
 6 1 3 8
 7 1 4 209
 8 1 4 10
 9 1 5 11
 10 1 5 210
 11 1 6 12
 12 1 6 211
 13 1 7 10
 14 1 8 11
 15 1 9 212
 16 1 9 12
 17 1 10 15
 18 1 10 30
 19 1 11 17
 20 1 11 26
 21 1 12 18
 22 1 12 27
 23 1 13 213
 24 1 13 21
 25 1 14 22
 26 1 14 214
 27 1 15 21
 28 1 16 22
 29 1 16 215
 30 1 17 23
 31 1 18 24
 32 1 19 216
 33 1 19 23
 34 1 20 24

Apéndice C. Topología de lodo base con nanosílice.

LAMMPS data file. CGCMM style. atom_style full

generated by VMD/TopoTools v1.8

on Fri Sep 17 15:42:30 -05 2021

11553 atoms

7270 bonds

3599 angles

0 dihedrals

0 impropers

10 atom types

2 bond types

1 angle types

0 dihedral types

0 improper types

0.058500 15.583500 xlo xhi

-0.111500 26.576500 ylo yhi

-0.154502 149.845498 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	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	# Oo	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

1	1	32	77
2	1	34	78
3	1	36	79
4	1	38	80
5	1	70	81
6	1	72	82
7	1	74	83
8	1	76	84
9	1	324	334
10	1	576	586
11	1	578	587
12	1	574	585
13	1	660	670
14	1	744	754
15	1	664	672
16	1	658	669
17	1	748	756
18	1	742	753
19	1	746	755
20	1	496	504
21	1	662	671
22	1	580	588
23	1	492	502
24	1	408	418
25	1	328	336
26	1	412	420
27	1	322	333
28	1	326	335
29	1	490	501
30	1	406	417
31	1	410	419
32	1	494	503
33	1	240	250

69	1	624	667
70	1	626	668
71	1	704	749
72	1	706	750
73	2	757	758
74	2	760	761
75	2	763	764
76	2	766	767
77	2	769	770
78	2	772	773
79	2	775	776
80	2	778	779
81	2	781	782
82	2	784	785
83	2	787	788
84	2	790	791
85	2	793	794
86	2	796	797
87	2	799	800
88	2	802	803
89	2	805	806
90	2	808	809
91	2	811	812
92	2	814	815
93	2	817	818
94	2	820	821
95	2	823	824
96	2	826	827
97	2	829	830
98	2	832	833
99	2	835	836
100	2	838	839
101	2	841	842
102	2	844	845
103	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	#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	4.309476	1.450048	0.589074	# Si	9393	1	3	0.000000	8.253151	11.286060	18.675608	# Hw
2	1	6	0.000000	0.568117	2.010496	0.012272	# Ob	9394	1	9	0.000000	10.277675	21.798004	142.859406	# Ow
3	1	8	0.000000	4.315521	1.912640	2.159938	# Oo	9395	1	3	0.000000	9.455759	21.109505	143.146667	# Hw
4	1	10	0.000000	1.721977	5.898048	0.589074	# Si	9396	1	3	0.000000	11.222820	21.465580	143.337204	# Hw
5	1	6	0.000000	3.155617	6.458496	0.012272	# Ob	9397	1	9	0.000000	4.166098	9.367703	56.051571	# Ow
6	1	8	0.000000	1.728021	6.360640	2.159938	# Oo	9398	1	3	0.000000	3.949370	8.386258	55.580513	# Hw
7	1	10	0.000000	1.977176	1.450048	5.277121	# Si	9399	1	3	0.000000	4.759492	9.211202	56.976498	# Hw
8	1	6	0.000000	0.543535	2.010496	5.853922	# Ob	9400	1	9	0.000000	11.249905	17.908833	91.626457	# Ow
9	1	8	0.000000	1.971132	1.912640	3.706257	# Oo	9401	1	3	0.000000	11.861205	17.233028	90.992653	# Hw
10	1	10	0.000000	4.564676	5.898048	5.277121	# Si	9402	1	3	0.000000	11.257254	18.930376	91.192291	# Hw
11	1	6	0.000000	3.131035	6.458496	5.853922	# Ob	9403	1	9	0.000000	5.594809	5.008508	96.190880	# Ow
12	1	8	0.000000	4.558631	6.360640	3.706257	# Oo	9404	1	3	0.000000	4.574431	5.073858	95.758842	# Hw
13	1	10	0.000000	1.977176	7.445952	5.277121	# Si	9405	1	3	0.000000	6.156103	4.190982	95.692184	# Hw
14	1	6	0.000000	0.543535	6.885504	5.853922	# Ob	9406	1	9	0.000000	1.536501	18.594301	116.460846	# Ow
15	1	8	0.000000	1.971132	6.983360	3.706257	# Oo	9407	1	3	0.000000	1.721256	19.137503	115.510635	# Hw
16	1	10	0.000000	4.564676	2.997952	5.277121	# Si	9408	1	3	0.000000	1.932853	17.560692	116.379257	# Hw
17	1	6	0.000000	3.131035	2.437504	5.853922	# Ob	9409	1	9	0.000000	6.920721	1.672589	30.057278	# Ow
18	1	8	0.000000	4.558631	2.535360	3.706257	# Oo	9410	1	3	0.000000	7.506058	0.814735	30.449152	# Hw
19	1	10	0.000000	4.309476	7.445952	0.589074	# Si	9411	1	3	0.000000	7.170910	1.833544	28.987886	# Hw
20	1	6	0.000000	0.568117	6.885504	0.012272	# Ob	9412	1	9	0.000000	11.151649	17.935404	106.560646	# Ow
21	1	8	0.000000	4.315521	6.983360	2.159938	# Oo	9413	1	3	0.000000	10.532125	18.844690	106.707230	# Hw
22	1	10	0.000000	1.721977	2.997952	0.589074	# Si	9414	1	3	0.000000	12.077902	18.203453	106.010826	# Hw
23	1	6	0.000000	3.155617	2.437504	0.012272	# Ob	9415	1	9	0.000000	13.265291	25.421061	91.604439	# Ow
24	1	8	0.000000	1.728021	2.535360	2.159938	# Oo	9416	1	3	0.000000	12.212467	25.610558	91.900673	# Hw
25	1	5	0.000000	4.358174	6.121875	79.881271	# Na	9417	1	3	0.000000	13.449279	25.850191	90.597420	# Hw
26	1	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	1	4	0.000000	3.143326	5.479936	2.933097	# Mg	9421	1	9	0.000000	9.811101	12.756308	57.785458	# Ow
30	1	4	0.000000	0.555826	1.031936	2.933097	# Mg	9422	1	3	0.000000	9.939548	11.899739	58.479641	# Hw
31	1	6	0.000000	4.772313	0.000000	0.000000	# Ob	9423	1	3	0.000000	9.077729	13.471827	58.212421	# Hw
32	1	7	0.000000	1.449849	0.000000	1.546319	# Oh	9424	1	9	0.000000	5.596063	2.740338	16.787752	# Ow
33	1	6	0.000000	2.184813	4.448000	0.000000	# Ob	9425	1	3	0.000000	6.058345	2.663756	17.793999	# Hw
								9426	1	3	0.000000	5.364012	1.723163	16.408796	# Hw

Bonds

1	1	32	77	1143	2	3967	3968
2	1	34	78	1144	2	3970	3971
3	1	36	79	1145	2	3973	3974
4	1	38	80	1146	2	3976	3977
5	1	70	81	1147	2	3979	3980
6	1	72	82	1148	2	3982	3983
7	1	74	83	1149	2	3985	3986
8	1	76	84	1150	2	3988	3989
9	1	324	334	1151	2	3991	3992
10	1	576	586	1152	2	3994	3995
11	1	578	587	1153	2	3997	3998
12	1	574	585	1154	2	4000	4001
13	1	660	670	1155	2	4003	4004
14	1	744	754	1156	2	4006	4007
15	1	664	672	1157	2	4009	4010
16	1	658	669	1158	2	4012	4013
17	1	748	756	1159	2	4015	4016
18	1	742	753	1160	2	4018	4019
19	1	746	755	1161	2	4021	4022
20	1	496	504	1162	2	4024	4025
21	1	662	671	1163	2	4027	4028
22	1	580	588	1164	2	4030	4031
23	1	492	502	1165	2	4033	4034
24	1	408	418	1166	2	4036	4037
25	1	328	336	1167	2	4039	4040
26	1	412	420	1168	2	4042	4043
27	1	322	333	1169	2	4045	4046
28	1	326	335	1170	2	4048	4049
29	1	490	501	1171	2	4051	4052
30	1	406	417	1172	2	4054	4055
31	1	410	419	1173	2	4057	4058
32	1	494	503	1174	2	4060	4061
33	1	240	250	1175	2	4063	4064
34	1	156	166	1176	2	4066	4067
				1177	2	4069	4070

Angles					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
# 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 p p p
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 mort_w400.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 ppm 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 lx 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

```

```

velocity    all create 300.0 123456789
fix ab all shake 0.0001 20 0 b 1 a 1

# ----- Equilibration (NPT) -----

print "----- Equilibration (NPT) start-----"
fix        f1 all npt temp 300.0 300.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run        2000000
unfix      f1
# ----- Equilibration (NVT) -----
print "----- Equilibration (NVT) start-----"
fix        f1 all nvt temp 300.0 300.0 ${tdamp}
run        3000000
unfix      f1
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_along 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}          # ensamble isoterminco 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
# termodinamica de salida cada N pasos de tiempo

thermo      ${nfrequ}

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 p p p
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 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
kpace_style ppm 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 lx 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 lx equal lx
variable ly equal ly
variable lz equal lz
variable density equal density

# ----- Check equilibration 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

# ----- Equilibration (NPT) -----

print "----- Equilibration (NPT) start-----"
fix f1 all npt temp 300.0 300.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run 2000000
unfix f1
# ----- Equilibration (NVT) -----
print "----- Equilibration (NVT) start -----"
fix f1 all nvt temp 300.0 300.0 ${tdamp}
run 3000000
unfix f1

# ----- Constraint for Viscosity -----
fix mom all momentum 100 linear 1 1 1 # momento lineal cero cada 100 timestep
#fix rigid all shake 1e-4 20 0 b 1 a 1 # enlaces y angulos en el equilibrio cada 20 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
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 isotermino 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

thermo ${nfrequ} # cual temperatura muestra
# termodinamica de salida cada N pasos de tiempo

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

```

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   p p p
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  ppm 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 lx 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
variable density equal density

# ----- Check equilibration 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
```

```
# ----- 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

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


# ----- 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           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 (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
```

NANOPARTÍCULAS USADAS EN LODOS DE PERFORACIÓN.

122

```

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

```

NANOPARTÍCULAS USADAS EN LODOS DE PERFORACIÓN.

123

900	25344	302.52788	-135473.5	48.067234	1.1105858
0.0025032078		165.08033			
1000	25344	299.13851	-135219.66	-78.842364	1.1102603
0.0027690241		149.21864			
1100	25344	297.78043	-135162.4	371.93444	1.1089466
0.0030400811		135.86051			
1200	25344	300.65259	-135387.72	-362.44134	1.1073392
0.003307429		124.81819			
1300	25344	302.52456	-135534.55	-93.187128	1.1072065
0.0035736538		115.51505			
1400	25344	299.39652	-135366.03	-45.900113	1.1087655
0.0038400654		107.55142			
1500	25344	298.34462	-135298.13	138.85784	1.1107221
0.004100091		100.78978			
1600	25344	300.16657	-135355.08	205.90897	
65481	1.0877022	0.035372552	11.601438		
14200	25344	303.27064	-133835.32	87.058067	
1.0882355	0.035637456	11.517082			
14300	25344	303.30149	-133871.99	-161.29057	
1.0893792	0.03590705	11.434614			
14400	25344	304.20186	-133981.03	152.60256	
1.0902374	0.036177717	11.352044			
14500	25344	302.25786	-133880	153.47314	
1.0899909	0.036450559	11.266222			
14600	25344	302.74378	-133916.49	191.57338	
1.0890173	0.036720098	11.180193			

NANOPARTÍCULAS USADAS EN LODOS DE PERFORACIÓN.

124

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

14900 25344 303.24412 -133940.48 -798.49898

1.0852101 0.037539162 10.923494

15000 25344 303.45536 -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

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total

Pair	2279.5	2279.5	2279.5	0.0	68.72
Bond	17.942	17.942	17.942	0.0	0.54
Kspace	299.72	299.72	299.72	0.0	9.04
Neigh	36.563	36.563	36.563	0.0	1.10
Comm	25.123	25.123	25.123	0.0	0.76
Output	1.2611	1.2611	1.2611	0.0	0.04
Modify	653.28	653.28	653.28	0.0	19.69
Other		3.597			0.11

Apéndice F. Validación nanopartícula de sílice.

```
#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 p p p
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 sio2_7A_h.dat # read initial data
replicate 1 1 1
set type 1 charge 0.40 #hs
set type 2 charge -0.55 #ob
set type 3 charge -0.675 #os
set type 4 charge 1.1 #si

kpspace_style pppm 1e-4
neighbor 7.0 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 lx 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 400000
unfix f1
write_data sio2_min.dat
# ----- reset timestep and dt -----
reset_timestep 0
timestep ${fs}

# ----- Output setting -----
dump md all custom 100 md.lammpstrj id mol type x y z ix iy iz

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
variable density equal density
```

```

# ----- Check equilibration 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
velocity      all create 300.0 123456789
fix ab all shake 0.0001 20 0 b 2 a 1
# ----- Equilibration (NPT) -----

print "----- Equilibration (NPT) start-----"
fix      f1 all npt temp 300.0 300.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000000
unfix    f1
# ----- Equilibration (NVT) -----
print "----- Equilibration (NVT) start -----"
fix      f1 all nvt temp 300.0 300.0 ${tdamp}
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   p p p
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 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 lj:    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) -----
fix          f1 all box/relax iso 0.0
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'
    100     23472.16      0      20.2    8242.408    221360.52    0.8182166
    200     22724.298      0      20.4    8489.664    193230.2    0.7943862
    300     22059.712      0      20.6    8741.816    167756.68    0.7714727
    400     21473.253      0      20.8    8998.912    144599.53    0.749436

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
Output  | 21.242   | 21.242   | 21.242   | 0.0     | 0.51
Modify  | 700.84   | 700.84   | 700.84   | 0.0     | 16.69
Other   |          | 7.005    |          |         | 0.17

Nlocal:      270.000 ave      270 max      270 min
Histogram: 1 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
Neighs:      120991.0 ave     120991 max     120991 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

```

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

```

#LAMMPS Input file
# Title
clear

# -----other settings -----
variable fs index 1 # 0.1 fs
variable ps index 100000 # 100 ps
variable nfreq index 100 # = Nvery * 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 p p p
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
pair_modify mix arithmetic
bond_style harmonic
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/types 2 extra/angle/types 3 extra/dihedral/types
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

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

# 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

kpace_style ppm 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 lx vol press density
thermo ${nfreq}

# ----- Relax calculation (0 K) -----
print "----- Relax calculation (0 K) -----"
fix f1 all box/relax iso 0.0
minimize 1.0e-10 1.0e-10 40000 400000
unfix f1
write_data min.dat

```

```
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
variable density equal density

# ----- Check equilibration 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

# ----- Equilibration (NPT) -----

print "----- Equilibration (NPT) start-----"
fix f1 all npt temp 300.0 300.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run 1000000
unfix f1
# ----- Equilibration (NVT) -----
print "----- Equilibration (NVT) start -----"
fix f1 all nvt temp 300.0 300.0 ${tdamp}
run 2000000
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-29Oct20/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 to 1 thread.
(src/lammps/lammps-29Oct20/src/comm.cpp:94)
  using 1 OpenMP thread(s) per MPI task

# -----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   p p p
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 dihedral no
pair_modify     mix arithmetic
bond_style      harmonic
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/types 2 extra/angle/types 3 extra/dihedral/types
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
0 extra/improper/types 0
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 ...
  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 lj:   0.0    1.0    1.0
special bond factors coul: 0.0    1.0    1.0

```

```

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/3d/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	70242440	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
read_data CPU = 0.083 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
set type 9 charge 1.0 #Na
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

```

```

MPS Input file
tle
r

---other settings -----
able fs index 1 # 0.1 fs
able ps index 100000 # 100 ps
able nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat
able nstep equal ${ps}/${fs}
able nstep2 equal ${ps}/(2*${fs})
able heatnpt equal 2000
able heatnvt equal ${heatnpt}*7
able tdamp equal ${fs}*100
able pdamp equal ${fs}*1000
--- Structure settings -----
s real
_style full
nsion 3
dary p p p
step ${fs}

--- Potential settings -----
_style lj/cut/coul/long 10.0 10.0
ial_bonds lj/coul 0.000000 1.000000 1.000000 angle yes dihedral no
_modify mix arithmetic
_style harmonic
e_style harmonic
tilt large
--Read structure-----
d_data mort_400_con_h.dat # read initial data
d_data mort_400_con_h.dat extra/atom/types 4 extra/bond/types 2 extra
_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

```

```

2999700    -72366.63    301.25729    19.326038    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
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 1
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
variable density equal density

```

----- Check equilibration setting -----

```

#fix fout2 all ave/time 1 100 100 v_pe v_ke v_evdwl
#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
```

----- Equilibration (NPT) -----

```
print "----- Equilibration (NPT) start-----"
```

```

fix          f1 all npt temp 500.0 500.0 ${tdamp}
run          1000000
unfix        f1

```

```

# 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

kpace_style ppm 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 lx 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 40000 400000
unfix f1
write_data min.dat

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

# ----- Equilibration (NVT) -----
print "----- Equilibration (NVT) start -----"
fix f1 all nvt temp 500.0 500.0 ${tdamp}
run 2000000
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-29Oct20/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 to 1 thread.
(src/lammps/lammps-29Oct20/src/comm.cpp:94)
  using 1 OpenMP thread(s) per MPI task

# -----other settings -----
variable fs index 1 # 0.1 fs
variable ps index 100000 # 100 ps
variable nfreq index 100 # = Nfreq * 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 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 p p p
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
pair_modify mix arithmetic
bond_style harmonic
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/types
read_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
  1 by 1 by 8 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 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
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
set type 9 charge 1.0 #Na
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

```

```

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
  (1) pair lj/cut/coul/long, perpetual
      attributes: half, newton on
      pair build: half/bin/newton
      stencil: half/bin/3d/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 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 atoms

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	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	59722	67995	74560	1937.5	65.96
Bond	287.99	346.44	457.67	259.2	0.34
Kspace	22873	29461	37796	2943.6	28.58
Neigh	3077.4	3078.9	3080	1.5	2.99
Comm	1435	1509.9	1564.5	114.3	1.46
Output	4.1793	4.3007	5.1298	15.1	0.00
Modify	437.77	468.39	501.01	96.8	0.45
Other		227.9			0.22