

Caracterización de fluidos confinados usando Dinámica Molecular

Proyecto Final de Módulo de Datos

Eduardo E. Escalante R.

March 17, 2021

LA-CoNGA-physics - Universidad Centroccidental "Lisandro Alvarado"



1. Resumen

2. La técnica de Dinámica Molecular

3. Modelo y detalles de la simulación

4. Resultados

Visualización de resultados después de aplicar técnicas aprendidas en el Módulo de Análisis de Datos

5. Conclusiones

Resumen

Se presenta un modelo computacional basado en la técnica de dinámica molecular, que permite determinar la función de distribución radial, FDR, y la función de autocorrelación de velocidades, VACF, para un fluido tipo Lennard-Jones confinado en cilindros con imperfecciones geométricas. El desarrollo de este modelo se inicia con simulaciones para cilindros cuyas paredes son superficies completamente lisas que permitió la comparación de la data obtenida con la reportada en la literatura. Al disponer de una estructura computacional lo suficientemente confiable se utilizó el modelo para cilindros lisos en la implementación de un módulo computacional que considerara las características de un cilindro acanalado y así determinar la FDR y la VACF de fluidos confinados en este tipo de sistemas.

Esto permitió realizar el estudio del efecto de la nueva geometría confinante sobre las propiedades estructurales y dinámicas del fluido, observando la evolución de cada una de las propiedades estudiadas y así poder realizar una adecuada interpretación de los fenómenos físicos reflejados en los resultados reportados. Con la data correspondiente a simulaciones de cilindros con diferente cantidad de obstáculos se muestran convenientes maneras para la visualización de los resultados y se sugiere un método físicamente más consistente en el estudio de este tipo de sistemas.

Para nuestro proyecto final usamos la data generada por los códigos en FORTRAN90 y le aplicamos procedimientos básicos de visualización, limpieza, estadística y análisis de datos aprendidos en el curso usando el lenguaje Python 3.

La técnica de Dinámica Molecular

En esta técnica se resuelven numéricamente las ecuaciones de movimiento de Newton para el sistema de muchas partículas interactuantes. La base de éste método está basado en generar trayectorias determinísticas en el espacio de fase del sistema, para luego ejecutar promedios temporales de los observables de interés a lo largo de las trayectorias y hacerlos igual a los promedios del ensamble de acuerdo al teorema ergódico de la mecánica estadística. Desde luego, las ecuaciones de movimiento de Newton conservan la energía total E , de aquí que las variables termodinámicas intensivas conjugadas tales como temperatura T y presión p sólo pueden deducirse indirectamente.

Estas exhiben fluctuaciones (debido a que el número de partículas N es finito y algunas veces muy pequeño) por lo que estas no deben despreciarse y necesitan una cuidadosa consideración. Dependiendo del problema en estudio, es ventajoso realizar la dinámica directamente en otros ensambles, como el de volumen V , temperatura T o presión constante. Esto se logra introduciendo acoplamientos adecuados mediante “*termostatos*” y/o “*barostatos*”.

Considérese un sistema de N partículas (átomos) con coordenadas cartesianas $\vec{X} = \{\vec{r}_i\}$, $i = 1, \dots, N$, en un espacio d -dimensional, denotando por d las dimensiones del espacio. Entonces la dinámica es descrita por las ecuaciones de movimiento de Newton,

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = - \frac{\partial U_{pot}}{\partial \vec{r}_i} = \vec{f}_i \quad (1)$$

donde m_i es la masa de la i -ésima partícula, y \vec{f}_i la fuerza que actúa sobre ella, la cual se asume debida completamente a interacciones con las otras partículas. Así, el potencial $U_{pot}(\vec{X}) = U_{pot}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ es escrito como

$$U_{pot} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j < i}^N U(\vec{r}_{ij}), \quad \vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j \quad (2)$$

en el último paso se ha considerado, por simplificación del problema, que U_{pot} es aditivo a pares.

El principio de la técnica de dinámica molecular es muy directo. Se considera una función potencial $U(r_1, \dots, r_N)$ para una serie de N partículas interactuantes y se resuelven numéricamente las ecuaciones clásicas de movimiento en un computador. Típicamente $N \approx 10^2 - 10^6$. Las soluciones a estas ecuaciones dan las trayectorias $(r_1(t), \dots, r_N(t), p_1(t), \dots, p_N(t))$ de las N partículas en el espacio de fase.

Considerando el caso más sencillo posible, N partículas clásicas sin estructura con posiciones r_1, \dots, r_N en un volumen V interactuando a través de una función potencial, la cual es una suma de potenciales pares:

$$U(r_1, \dots, r_N) = \sum_{i < j} u(r_{ij}) \quad (3)$$

donde $r_{ij} = |r_i - r_j|$ es la separación entre las partículas i y j . Sin campo externo, la fuerza F_i que actúa sobre la partícula i es entonces:

$$F_i = \frac{\partial U}{\partial r_i} = \sum_{j \neq i} f_{ij} \quad (4)$$

Aquí f_{ij} es la fuerza sobre la partícula i debida a su interacción con la partícula j :

$$f_{ij} = \frac{\partial u(r_{ij})}{\partial r_{ij}} = - \frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{r_{ij}}{|r_{ij}|} \quad (5)$$

Entonces las ecuaciones de movimiento de Newton son:

$$m_i \ddot{r}_i = F_i \quad (6)$$

Dadas las posiciones $r_i(0)$ y las velocidades $\dot{r}_i(0)$ iniciales para $i = 1, \dots, N$ la serie de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden pueden resolverse para obtener las posiciones $r_i(t)$ y velocidades $\dot{r}_i(t)$ en tiempos posteriores. En nuestras simulaciones de dinámica molecular, esto se lleva a cabo numéricamente en un computador para una serie típicamente de $N \geq 1000$ partículas.

Para un sistema Lennard-Jones, cuyo potencial de interacción es

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (7)$$

se obtiene que la energía potencial del sistema y la ecuación de movimiento son dadas por:

$$U(r_1, \dots, r_N) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j < 1}^N \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (8)$$

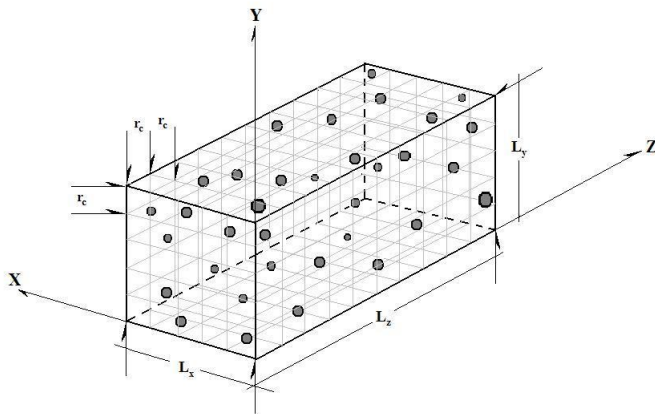
$$m\ddot{r}_i = 48\epsilon \sum_{i \neq j}^{N-1} \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \frac{r_{ij}}{r_{ij}^2} \quad (9)$$

Modelo y detalles de la simulación

Nuestra región de simulación es un paralelepípedo de lados L_x , L_y y L_z ; y su volumen definido por $V_{sim} = L_x \times L_y \times L_z$. Este volumen se divide en celdas cúbicas de lado r_c (el radio de interacción entre las partículas, parámetro originado de la convención de imagen mínima)

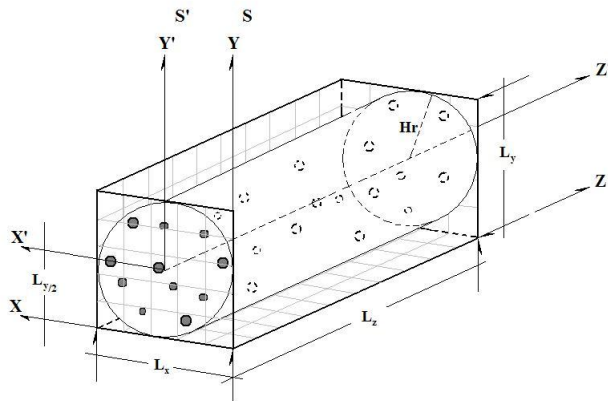
MODELO Y DETALLES DE LA SIMULACIÓN

Llamando región de simulación primaria a la región definida anteriormente y mostrada en la figura, esta se rodea por todos lados de réplicas exactas de ella misma, para realizar simulaciones de un sistema compuesto por un fluido infinito, es decir sin paredes confinantes; y como a partir de ella se originan las superficies confinantes, esta se describe en un sistema de coordenadas cartesianas.

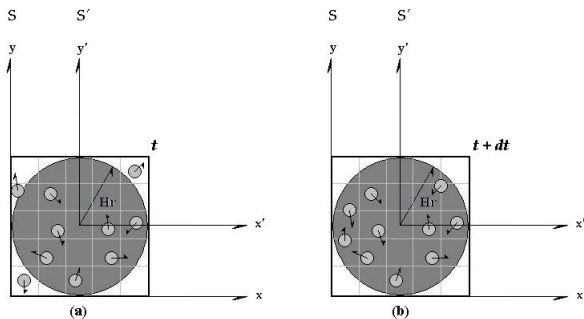


MODELO DE PORO CON PAREDES LISAS

Se ha considerado un sistema de N partículas esféricas confinadas en un poro cilíndrico cuyo radio es Hr y longitud L_z . La superficie interna del cilindro es una superficie lisa, de manera que el volumen dentro del cilindro es $V = \pi H^2 L_z$. La pared del poro es infinitamente dura y la condición de frontera periódica (CFP) se aplica únicamente a lo largo de la dirección z , para así representar la dirección longitudinal de un poro de extensión infinita.



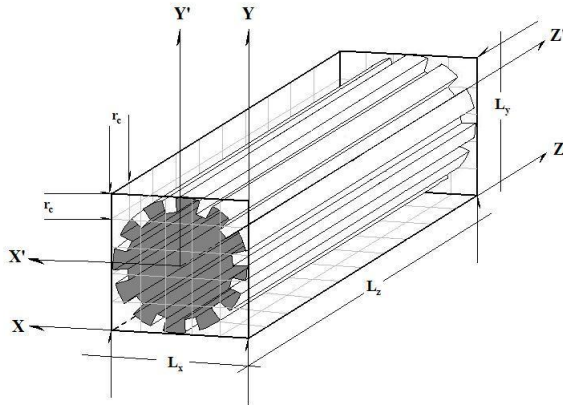
CONDICIÓN BOUNCE-BACK



Consiste en evitar que las partículas escapen del poro, si en algún paso de la simulación la posición de cualquier partícula i viola esta condición, esta se reintroduce inmediatamente dentro de la tubería a la misma posición en la que se encontraba, y su velocidad es invertida, es decir $\vec{v}_i \rightarrow -\vec{v}_i$.

MODELO DE PORO CON PAREDES ACANALADAS

El modelo de poro acanalado está basado nuevamente en el uso de condiciones de borde Bounce-Back, utilizadas para modelar el poro cilíndrico de paredes lisas. Este modelo de poro acanalado puede ser un modelo sencillo de algún material real que cumpla con la geometría descrita en este trabajo o, por otro lado, el punto de partida para simular modelos reales con geometrías más complicadas.



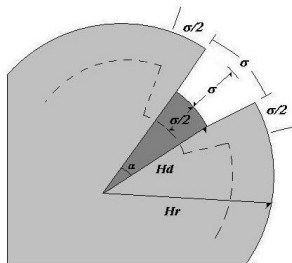
Debido a que esta región de simulación ha sido generada a partir de un cilindro liso de radio Hr , es fácil ver, de la figura, que los obstáculos dentro de la región de simulación tienen tamaño definido por la expresión $Hr - Hd$, siendo Hd el radio de un cilindro concéntrico al cilindro de radio Hr y que en todas las simulaciones realizadas en este trabajo su valor está determinado por la expresión $Hd = Hr - \sigma$.

Estos obstáculos fueron ubicados de manera tal que la distancia entre ellos sea la misma. Ahora el volumen del cilindro está definido por la siguiente expresión:

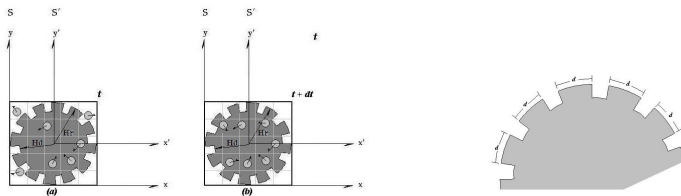
$$V = \left\{ \pi \cdot Hr^2 - \frac{n}{2} \cdot \alpha \cdot [Hr^2 - Hd^2] \right\} \cdot L_z$$

donde n corresponde al número de obstáculos presentes.

MODELO DE PORO CON PAREDES ACANALADAS



La zona perteneciente a los obstáculos geométricos debe ser determinada por una condición angular, que indique donde comienza y donde termina cada uno de ellos. Esta región puede definirse como el ángulo, denotado por α , cuyo vértice se encuentra en el centro de la sección transversal del cilindro acanalado y mostrado en detalle en la figura como la zona más oscura de la gráfica.



Sección transversal del cilindro acanalado y detalle que muestra la distancia entre obstáculos consecutivos. Esta distancia fue el parámetro modificado en las simulaciones realizadas.

$N = 600$	$Hr^* = 10$	$dt^* = 0.001$
$\rho^* = 0.8$	$Hd^* = 9.0$	$t_{max}^* = 1000$
$T^* = 1.173$	$L_z = 2.66$	$t_{equil}^* = 100$

Valores de los parámetros de simulación utilizados, donde se especifican el número de partículas N , la densidad ρ^* , temperatura T^* , radio del cilindro Hr , tamaño del diente tomado desde el centro del cilindro hasta el extremo del obstáculo Hd y longitud de la celda de simulación L_z , así como los tiempos de la simulación.

Obstáculos	2	3	5	12	15	20
Partículas / Espacio vacío	29	19	11	3	2	1

Número de obstáculos y cantidad de partículas que pueden alojarse entre dos consecutivos para los diferentes cilindros acanalados utilizados en las simulaciones.

Siguiendo el algoritmo postulado por Frenkel et al, este programa se ha construido para que su ejecución se desarrolle de la siguiente manera:

1. Lectura de los parámetros que especifican las condiciones de la ejecución del programa (temperatura inicial, número de partículas, densidad, paso temporal de la simulación, entre otros).
2. Inicialización del sistema (asignación de posiciones y velocidades iniciales).
3. Cálculo de la fuerza sobre cada una de las partículas.
4. Integración las ecuaciones de movimiento de Newton. Este paso y el anterior constituyen los más importantes de la simulación, siendo repetidos hasta completar el tiempo total de simulación. En esta etapa de ejecución del programa de dinámica molecular se realizan los cálculos que permiten observar la evolución temporal del sistema para el tiempo escogido.
5. Después de completarse el lazo central, se calculan e imprimen los promedios de las cantidades medidas y se finaliza la ejecución.

Resultados

LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN RADIAL (*FDR*)

La función de distribución radial (*FDR* ó $g(r)$) es un ejemplo típico de una función de correlación par, que describe cómo, en promedio, los átomos en un sistema se encuentran ubicados radialmente alrededor de otro. Esta ha probado ser una manera particularmente efectiva de describir la estructura promedio de sistemas moleculares desordenados tales como los líquidos.

Construir una función de distribución radial es un procedimiento sencillo. Se escoge un átomo en el sistema y se construyen alrededor de éste una serie de esferas concéntricas, escogiendo una pequeña distancia de separación Δr , como se muestra en la figura.

A intervalos regulares se toma una “fotografía” del sistema y se hace un conteo de las partículas encontrados en cada una de las “conchas”. Al final de la simulación, se calcula el número promedio de átomos en cada una de estas “regiones” y se divide por su volumen y la densidad promedio de partículas en el sistema. El resultado de éste procedimiento es la función de distribución radial. La expresión que la describe matemáticamente es:

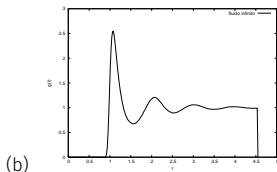
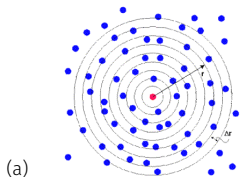
$$g(r) = \frac{n(r)}{(\rho 4\pi r^2 \Delta r)} \quad (10)$$

donde $g(r)$ es la *FDR*, $n(r)$ el número promedio de partículas en una “concha” de grosor Δr a una distancia r , ρ es la densidad promedio de las partículas. Este método no necesita restringirse a una sola partícula. Todas las partículas en el sistema pueden tratarse de esta manera, lo que resulta en una determinación mejorada de *FDR*, como un promedio sobre muchas o todas las partículas confinadas.

LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN RADIAL (*FDR*)

La *FDR* usualmente se grafica como una función de la separación, r , entre las partículas.

Esta revela una serie de rasgos importantes. Primero, a pequeñas separaciones (r pequeño) la *FDR* es cero. Esto indica el ancho efectivo de las partículas, debido a que estas no pueden acercarse completamente. Segundo, aparecen una serie de máximos, indicando que las partículas se empaquetan unas alrededor de las otras en “*capas*” de vecinos. La aparición de los máximos a rangos largos indican un alto grado de orden. Usualmente, a altas temperaturas estos son anchos, lo que indica movimiento térmico, mientras que a bajas temperaturas son más delgados. En materiales cristalinos estos indican las posiciones donde los átomos se encuentran confinados. A rangos muy largos toda *FDR* tiende al valor de 1, lo cual ocurre debido a que la *FDR* describe la densidad promedio en ese rango.

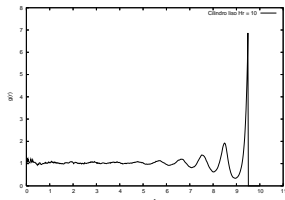
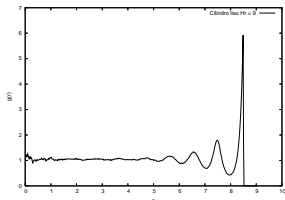


Funciones de distribución radial para cilindros lisos de (a) Esferas concéntricas para construir la función de distribución radial de un fluido y (b) Función de distribución radial de fluido infinito obtenida mediante la simulación de dinámica molecular para $N = 600$, $T^* = 0.173$ y $\rho^* = 0.8$.

LA FDR EN CILINDROS LISOS

Se obtuvo la función de distribución radial de un fluido confinado en un cilindro liso con diferentes radios. En el caso de las FDR's mostradas en la figura el radio de los cilindros utilizados en la simulación es de $Hr = 9.0\sigma$ y $Hr = 10.0\sigma$ para una densidad de $\rho^* = 0.8$ respectivamente.

En estas gráficas, acordes con las reportadas en la literatura, la posición radial $r = 0$ denota el centro del poro cilíndrico. Debido a que ninguna partícula puede estar localizada a una distancia menor de 0.5σ de la pared, la posición de las partículas ubicadas justo sobre la superficie de la pared es de $r = 8.5\sigma$ para $Hr = 9.0\sigma$ y $r = 9.5\sigma$ para $Hr = 10.0\sigma$. También las FDR's muestran estructuras de capas que tienen un máximo localizado a 0.5σ de la pared indicando que las partículas que conforman el fluido tienden a ubicarse sobre las paredes del poro confinante. Esta formación de capas tiende a ser más pronunciada a medida que la densidad aumenta.

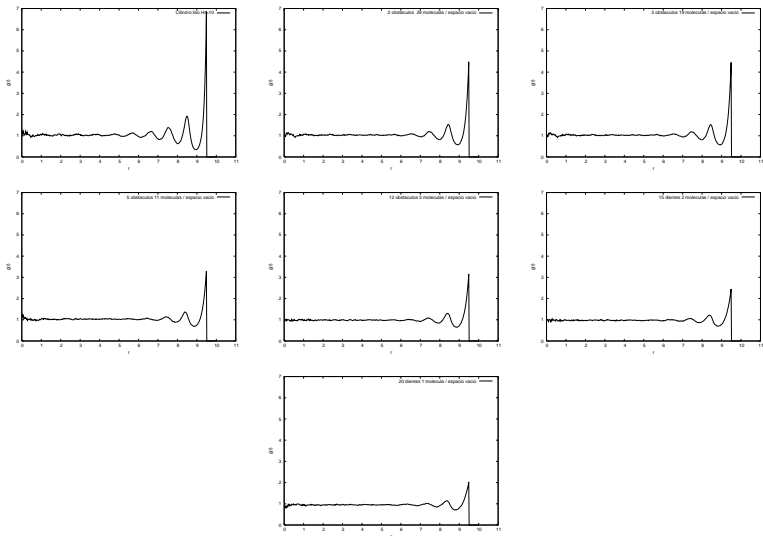


Las FDR 's del fluido confinado en un cilindro acanalado de radio $Hr = 10\sigma$ y diferente cantidad de obstáculos, en el rango de 2 a 20 obstáculos, se muestran en la siguiente lámina. En esta figura, todas las FDR 's se graficaron de tal manera que la pared coincide con $r^* = 10\sigma$.

Las gráficas muestran que, para todas las cantidades de obstáculos seleccionadas, la función de distribución radial presenta un comportamiento similar: disminución de los máximos de probabilidad relacionados directamente con el aumento del número de obstáculos. Validando nuestro método.

La secuencia gráfica de las simulaciones muestra que la cantidad de partículas en las cercanías de la pared del cilindro disminuye a medida que aumenta la cantidad de obstáculos distribuidos sobre la pared, evidenciando una significativa disminución de la probabilidad en $r = 9.5\sigma$.

LA FDR EN CILINDROS ACANALADOS



Funciones de distribución radial para simulaciones con $N = 600$, $T^* = 1.173$, $\rho^* = 0.8$ y con obstáculos de dimensiones σ , obtenidas para un cilindro liso y cilindros acanalados de 2, 3, 5, 12, 15 y 20 obstáculos respectivamente (ordenadas de izquierda a derecha y de arriba hacia abajo)

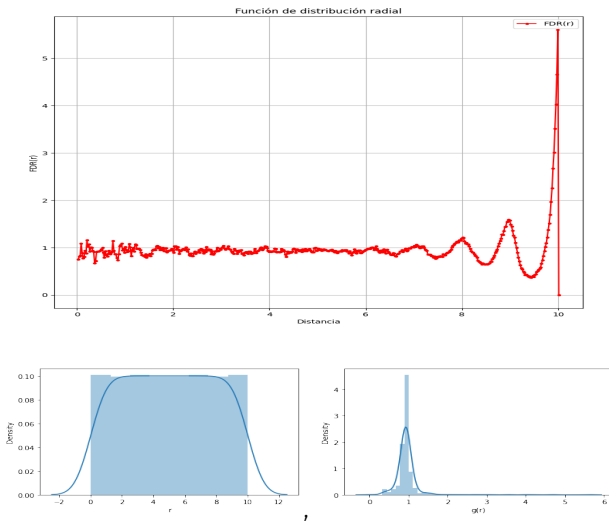
VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (FDR)

Todas las gráficas mostradas anteriormente fueron obtenidas a partir de la data resultante de las simulaciones y su visualización se implementó usando GNUplot.

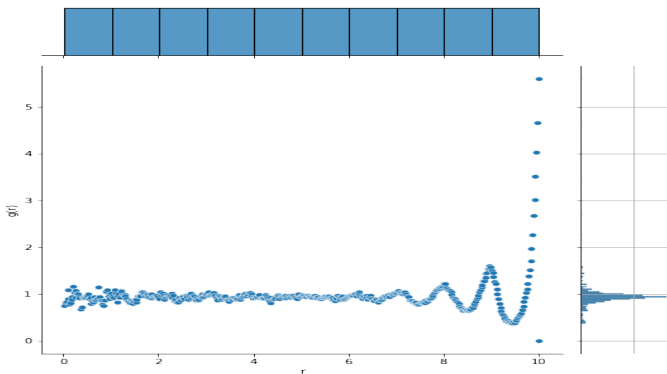
Las gráficas mostradas en la siguiente lámina fueron obtenidas aplicando el lenguaje de programación Python y los métodos básicos de análisis y visualización de data aprendidos en el Módulo de Ciencia de Datos. Implementando el lenguaje Python y las diversas librerías para manejo de archivos de datos, graficación y muestreo estadístico.

Las gráficas muestran la representación de la función de densidad de probabilidad y el histograma de los puntos en función de cada eje graficado.

VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (FDR)

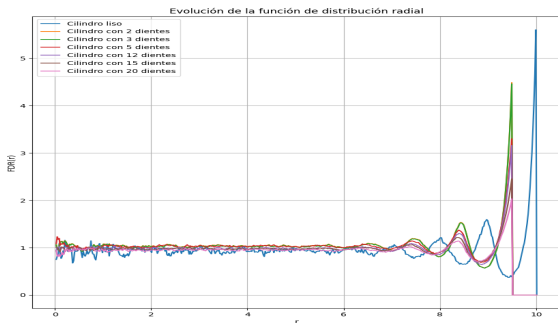


VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (FDR)



Una forma más práctica de visualizar las características de la data es juntando su gráfica con los histogramas correspondientes a cada variable en una sola gráfica, con lo cual se más evidente el significado de cada histograma.

VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (FDR)



La variación en los máximos de la FDR puede observarse en la gráfica de superposición de las FDR, los métodos de tratamiento y análisis de datos aplicados para obtener la presente gráfica se desarrollaron con los conocimientos adquiridos en el Módulo de Ciencia de Datos. Ella muestra la evolución en la estructura del fluido confinado en un cilindro acanalado, a medida que la cantidad de obstáculos aumenta, llevando finalmente al caso en que al no tener espacio entre obstáculos consecutivos las partículas se redistribuyen generando el caso límite de un cilindro liso de radio $Hr = 9.0\sigma$.

Finalmente podrá encontrar en el notebook de Jupyter, que registra los métodos aplicados a la presente data, una animación que representa la respuesta de la estructura del sistema a cambios en las paredes del volumen confinante.

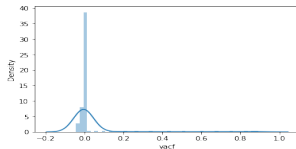
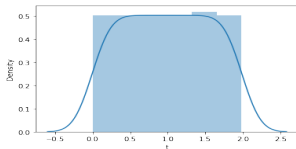
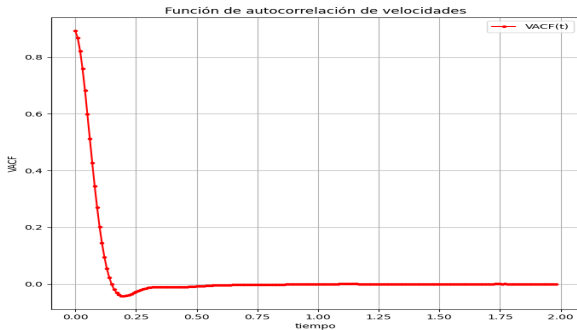
VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (VACF)

En dinámica molecular, las funciones de correlación son primordiales para determinar el promedio de propiedades dependientes del tiempo. Sin embargo, es importante hacer notar que la utilidad de las funciones de correlación no es exclusiva de fenómenos dependientes del tiempo ya que las correlaciones espaciales son igualmente importantes. De hecho, la dependencia temporal de las funciones de correlación podría reemplazarse por una dependencia de la distancia, sin que se viole ningún principio.

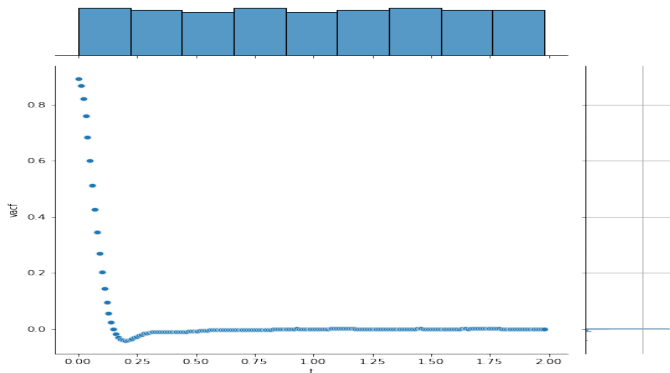
El ejemplo más conocido de una función de correlación es la función de autocorrelación de velocidades, VACF, la cual relaciona la velocidad de una partícula con ella misma (de ahí el término de autocorrelación). Correlacionando la velocidad de una partícula a un tiempo dado, con su velocidad a un tiempo posterior se revelan que efectos han tenido las fuerzas interatómicas en el movimiento de la partícula. De no existir fuerzas, la velocidad de la partícula nunca cambiará, y la correlación tendría un valor fijo en todo momento. De hecho a tiempos pequeños las fuerzas no tienen mucho efecto y la correlación es alta, pero a medida que la partícula interactúa con sus vecinos, la velocidad cambia y la correlación es reducida. Por lo tanto la función de correlación revela la escala temporal para los cambios en el movimiento atómico, revelando, por ejemplo, el tiempo promedio entre las colisiones partícula-partícula.

Presentamos la gráfica de una función de autocorrelación de velocidades, que muestra como va decayendo rápidamente la correlación desde una correlación completa al tiempo cero. Después de un corto descenso a un valor máximo negativo esta se incrementa nuevamente (haciéndose positiva en algunos casos). El comportamiento a tiempos largos es un avance hacia una correlación nula, es decir tiende a cero. El primer descenso hacia una correlación negativa es señal de que en el promedio la partícula colisiona con su vecino y retrocede; obteniendo así una velocidad en la dirección opuesta (signo negativo).

VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (VACF)

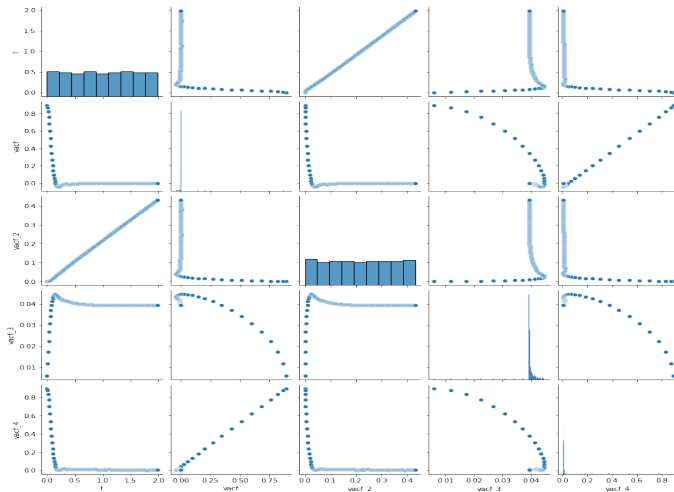


VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (VACF)



Unión de la gráfica de nuestro dataframe con los histogramas correspondientes a cada variable en una sola.

VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (VACF)



Cuando tenemos un dataframe con multiples columnas podemos graficar la relación entre columnas en un arreglo que muestra todas las combinaciones posibles a graficar permitiendonos reconocer patrones y poder plantearnos la estrategia de análisis más conveniente!

VISUALIZACIÓN DE RESULTADOS DESPUÉS DE APLICAR TÉCNICAS APRENDIDAS EN EL MÓDULO DE ANÁLISIS DE DATOS (*GRÁFICA DE DISTRIBUCIÓN DE VELOCIDADES*)

El siguiente paso planteado en el desarrollo de nuestro proyecto es la visualización y análisis de la data que almacena las velocidades de cada partícula confinada dentro de los cilindros, con la cual podemos construir sus histogramas y ver su distribución estadística. Lamentablemente no la realizaré debido a los problemas presentados en la realización de este reporte.

Conclusiones

CONCLUSIONES

- Hubo momentos en el desarrollo de nuestro proyecto en que los procesos de lectura de datos y exploración de los mismos se solapaban. Esto debido principalmente a que en la fase de registro de datos (realizada con simulaciones implementadas en FORTRAN 90) los ajustes que para ese lenguaje fueron simplemente "cosméticos", es decir sin ninguna relevancia en la lectura/escritura de los mismos, generó problemas al tratar de ser usados en la implementación del análisis con Python y sus librerías. Por lo tanto una de las lecciones más valiosas del Módulo de Ciencia de Datos es que siempre se debe ser cuidadoso con los formatos de escritura al registrar la data.
- Las herramientas que brinda python para el análisis y visualización de los datos ahorran tiempo y esfuerzo que puede ser invertido en un análisis mucho más profundo de los mismos. Este lenguaje nos permite transmitir información de manera interactiva y eficiente. Es una forma de resumir hallazgos y mostrarlos en una forma que facilite la interpretación y pueda ayudar a identificar patrones o tendencias. En este curso he aprendido explotar estas características aprendiendo a crear gráficos interesantes, aplicarles métodos estadísticos básicos y a personalizarlos para hacerlos más efectivos y agradables para cualquier audiencia.
- **La Máquina Virtual**, todo el procesamiento y visualización de la data fue realizado en este tipo de ambiente. El módulo nos enseñó a instalar sistemas virtualizados, estos sistemas operativos virtualizados nos permiten ejecutar programas y realizar la totalidad de tareas que podríamos realizar en una sistema operativo real. Usamos la máquina virtual debido a su utilidad y beneficios, a continuación indico las principales razones de uso en nuestro proyecto final:
 1. Debido a requerimientos de Kernels y librerías específicas la máquina virtual provee el software necesario que no está disponible en nuestro sistema operativo.
 2. La virtualización de sistemas operativos y de servidores supone un ahorro económico y de espacio considerable. Mediante el uso de la virtualización evitamos la inversión en multitud de equipos físicos ahorrando dinero y espacio.
 3. Nos garantiza trabajar en un ambiente que hace que nuestras implementaciones sean reproducibles!
 4. El software evoluciona debido a los avances tecnológicos haciendo obsoletos cualquier sistema. Nuestra máquina virtual nos provee el ambiente original en el cual se implementaron los códigos.

- El estudio de las características estructurales del fluido en este trabajo se llevó a cabo mediante un muestreo que permite obtener la función de distribución radial como función de la distancia al centro del cilindro utilizando el método de conteo por conchas. Este procedimiento, comunmente usado en el estudio de fluidos infinitos o de fluidos confinados en superficies homogéneas, permitió demostrar que al incorporar obstáculos superficiales, se genera una FDR que resalta principalmente los aspectos globales del reacomodo estructural del fluido sin detallar el aspecto local generado por la presencia de la inhomogeneidad. Por tal razón y para garantizar la integridad de la función de distribución radial transversal se hace necesario realizar muestreos en los que deben barrerse zonas mucho más pequeñas que se ajusten a la geometría del sistema en comparación al conteo global realizado por conchas.
- La función de autocorrelación de velocidades proporciona el medio de investigar procesos de colisión en sistemas moleculares. Es capaz de distinguir entre sólidos, líquidos y gases a partir de su movimiento molecular y esto revela las escalas temporales en las que ocurren las colisiones moleculares.

A una temperatura fija, la proporción a la cual chocan las moléculas está determinada por la densidad. Esto ocurre porque las moléculas a baja densidad tienen que viajar mayor distancia entre colisiones lo que reduce la rata de colisión. La $VACF$ decae a cero a medida que se incrementa el tiempo debido a que el movimiento de las moléculas es afectado por las fuerzas intermoleculares. Cuando la función se hace cero, nos brinda una medida del tiempo medio entre colisiones ya que representa el punto donde se invierte la dirección de la velocidad en una colisión. De aquí resulta que entre más rápido decaiga la $VACF$ a cero, más corto es el tiempo entre las colisiones.

En la literatura pocos trabajos han estudiado los efectos que tiene la rugosidad superficial de un cilindro sobre la $VACF$ o sobre el coeficiente de difusión del fluido confinado [1]. Tomando en cuenta los pocos trabajos realizados y con la finalidad de caracterizar de manera detallada el comportamiento de la $VACF$ obtenida en cada una de las simulaciones, entonces a partir de esta función puede determinarse el coeficiente de difusión usando las relaciones estadísticas de Green-Kubo. Se comienza el estudio de la $VACF$ de la misma manera que en el cálculo de las FDR 's, verificando el comportamiento para un fluido infinito, y luego comparar la data obtenida con las $VACF$'s reportadas en la literatura [2, 3, 4, 5, 6]. Este procedimiento permite verificar la confiabilidad del programa, para posteriormente desarrollar el análisis del comportamiento de las $VACF$'s correspondientes al fluido confinado en el cilindro.

- [1] Chen, J., Peng, X. F., Lee, D. J. *Journal of Colloids and Interface Science* 296, 732-742. 2006.
- [2] D. A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*. Harper and Row, New York, 1975.
- [3] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulations of Liquids*. Clarendon Press, 1987.
- [4] D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, California. 2002.
- [5] D. C. Rappaport. *The Art of Molecular Dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge. 1995.
- [6] Shiang-Tai, L., Blanco, M. and Goddard, W. A. *J. Chem. Phys.* 119, 22. 2003.