



# **ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL**

## **Facultad de Ingeniería en Ciencias de la Tierra**

**“DIFUSIÓN DE LOS ASFALTENOS EN HIDROCARBUROS SATURADOS,  
AROMÁTICOS Y AGUA”**

### **PROYECTO DE GRADO**

Previa a la obtención del Título de:

### **INGENIERO EN PETRÓLEO**

Presentado por:

**WASHINGTON GENARO COTERA MENDOZA**

**KARLA STEFANÍA RODRÍGUEZ TORRES**

**GUAYAQUIL-ECUADOR**

**2017**

## **DEDICATORIA**

A mis padres Sr. Washington Coteria y Sra. María Mendoza con mucho cariño y amor les dedico todo el esfuerzo invertido en esta etapa de mi vida.

Washington Genaro Coteria Mendoza.

## DEDICATORIA

A mis padres, Sr. Carlos Rodríguez y Sra. Kathia Torres; hermanos, Bryan y Andy por ser mi más grande inspiración y motor para la culminación de mi carrera.

A mis abuelas y abuelo quienes me brindaron toda su ayuda, a Iván Fajardo e Irene Choca por su apoyo incondicional, amigos de la carrera de Petróleos que se llegaron a convertir en mis hermanos.

Karla Stefanía Rodríguez torres.

## **AGRADECIMIENTO**

A Dios por estar siempre, por ser nuestra protección, apoyo espiritual a lo largo de la carrera, guiándonos y mostrándonos el camino correcto.

Al Ing. Bryan Medina, por hacernos partícipes de este increíble proyecto, por guiarnos y despejar nuestras dudas.

A nuestra querida Universidad Escuela Superior Politécnica del Litoral por proporcionarme la enseñanza necesaria para enfrentar la vida profesional tanto ética y moral.

A nuestros demás familiares y amigos gracias por todo.

Washington Genaro Coterá Mendoza.

Karla Stefanía Rodríguez Torres.

# **TRIBUNAL DE GRADUACIÓN**

---

**Msc. Romel Angel Erazo Bone  
PRESIDENTE DEL TRIBUNAL**

---

**Msc. Romel Ángel Erazo Bone  
DIRECTOR DE MATERIA INTEGRADORA**

---

**Msc. Fidel Chuchuca Aguilar  
MIEMBRO EVALUADOR**

## **DECLARACIÓN EXPRESA**

“La responsabilidad del contenido de esta Tesis de Grado, nos corresponde exclusivamente; y el patrimonio intelectual de la misma, a la Escuela Superior Politécnica del Litoral”

(Reglamento de Exámenes y Títulos Profesionales de la  
ESPOL)

---

**Washington Genaro Coteria Mendoza**

---

**Karla Stefanía Rodríguez Torres**

## RESUMEN

La presente investigación se refiere a la aplicación del Software GROMACS para el cálculo de las constantes de difusión de una molécula de asfaleno en diferentes fluidos (hidrocarburos saturados, hidrocarburos aromáticos y agua). En el Capítulo 1 se expresa la justificación se describe el problema, el preámbulo y se establecen los objetivos que se desean alcanzar en el proyecto. En el Capítulo 2 se describen cada una de las bases que soportan la investigación, tales como: la dinámica molecular, fenómeno difusivo, Leyes de Fick y la información de los diferentes softwares empleados en el desarrollo del proyecto. En el Capítulo 3 se detalla la metodología seguida para el modelamiento de las moléculas en el software Avogadro y el procesamiento de los datos realizados en el software GROMACS. En el Capítulo 4 se realiza el análisis de los resultados, comparando las constantes de difusión de los diferentes sistemas mediante las gráficas obtenidas de desplazamientos cuadráticos medios vs tiempo. En el Capítulo 5 se exponen las conclusiones y recomendaciones del proyecto.

Palabras clave: aromáticos, saturados, GROMACS, asfaltenos.

# ÍNDICE GENERAL

DEDICATORIA .....	II
DEDICATORIA .....	III
AGRADECIMIENTO .....	II
TRIBUNAL DE GRADUACIÓN .....	III
DECLARACIÓN EXPRESA .....	II
RESUMEN .....	II
ÍNDICE GENERAL.....	II
ABREVIATURAS .....	II
SIMBOLOGÍA .....	II
ÍNDICE DE FIGURAS.....	III
ÍNDICE DE TABLAS .....	II
<b>CAPITULO 1</b> .....	<b>3</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b> .....	<b>3</b>
1.1. Preámbulo .....	4
1.2. Planteamiento del problema .....	4
1.3. Justificación .....	5



1.4.	Objetivos.....	6
1.4.1.	Objetivo General .....	6
1.4.2.	Objetivos Específicos .....	6
1.5.	Metodología .....	6
<b>CAPÍTULO 2.....</b>		<b>8</b>
<b>DESCRIPCIÓN DEL ÁREA DE ESTUDIO .....</b>		<b>8</b>
2.1.	Simulación Dinámica Molecular .....	9
2.2.	Propiedades Dinámicas .....	10
2.2.1.	Funciones de autocorrelación de velocidades .....	10
2.2.2.	Desplazamiento Cuadrático Medio.....	10
2.3.	Difusión.....	11
2.3.1.	Difusión a nivel macroscópico.....	11
2.3.2.	Segunda Ley de Fick.....	14
2.3.3.	Modelo Atomístico de la difusión.....	15
2.4.	Componentes obtenidos del fraccionamiento del petróleo.....	16
2.4.1.	Saturados.....	16
2.4.2.	Aromáticos .....	17
2.4.3.	Resinas .....	17
2.4.4.	Asfaltenos .....	17
2.5.	Simulador GROMACS .....	18
2.6.	Avogadro .....	18
2.7.	Automated Topology Builder (ATB) .....	19
<b>CAPÍTULO 3.....</b>		<b>21</b>
<b>METODOLOGÍA.....</b>		<b>21</b>

3.1. Procedimiento Computacional.....	22
3.1.1. Moléculas empleadas.....	22
3.1.2. Información de las moléculas.....	24
3.1.3. Sistemas. ....	24
3.1.4. Minimización .....	28
3.1.5. Simulación.....	29
3.1.6. Resultados. ....	29
3.1.7. Procesamiento de datos y cálculos.....	30
<b>CAPÍTULO 4.....</b>	<b>31</b>
<b>ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS .....</b>	<b>31</b>
4.1. Sistema Asfalteno-Agua .....	33
4.2. Sistema Asfalteno-Tolueno.....	35
4.3. Sistema Asfalteno-Octano .....	36
4.4. Constantes de difusión .....	37
<b>CAPÍTULO 5.....</b>	<b>41</b>
<b>CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....</b>	<b>41</b>
CONCLUSIONES .....	42
RECOMENDACIONES .....	<b>¡Error! Marcador no definido.</b>

ANEXOS

BIBLIOGRAFÍA

## **ABREVIATURAS**

ATB	Automated Topology Builder
SARA	Saturados, Aromáticos, Resina, Asfaltenos
DCM	Desplazamiento cuadrático medio.

## SIMBOLOGÍA

$\Delta t$	Variación de tiempo
$m$	Masa
$\rho$	Densidad
$J$	Flujo másico
$v$	Volumen
$c$	Concentración
$\Delta c$	Gradiente de concentración
$\Delta x$	Variación de posición
$\Delta x^2$	Desplazamiento cuadrático medio
$D$	Constante de difusión

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1.1</b> Metodología de trabajo .....	7
<b>Figura 2.1</b> J: Max Flux (Flujo de masa) masa por unidad .....	12
<b>Figura 2.2</b> Transferencia de masa con respecto a x .....	14
<b>Figura 2.3</b> Logo de GROMACS.....	18
<b>Figura 2.4</b> Logo de Avogadro.....	18
<b>Figura 2.5</b> Logo de ATB .....	19
<b>Figura 3.1</b> Molécula de asfalteno $C_{56}H_{71}N$ .....	23
<b>Figura 3.2</b> Molécula de hidrocarburo saturado (OCTANO) .....	23
<b>Figura 3.3</b> Molécula de hidrocarburo aromático (TOLUENO) .....	24
<b>Figura 3.4</b> Celda llena de agua y una molécula de asfalteno.....	25
<b>Figura 3.5</b> Sistema Asfalteno - Octano .....	27
<b>Figura 3.6</b> Celda de tolueno y asfalteno combinadas .....	28
<b>Figura 4.1</b> DCM 3D vs Tiempo Sistema Asfalteno-Agua. ....	34
<b>Figura 4.2</b> DCM 3D vs Tiempo Sistema Asfalteno – Tolueno .....	36
<b>Figura 4.3</b> DCM 3D vs Tiempo Sistema Asfalteno – Octano.....	37
<b>Figura 4.4</b> Sistema Asfalteno - Agua, recta para el cálculo de la pendiente 0.1<t<1.....	38
<b>Figura 4.5</b> Sistema Asfalteno - Tolueno, recta para el cálculo de la pendiente 0.1<t<1.....	38

**Figura 4.6** Sistema Asfalteno - Octano, recta para el cálculo de la pendiente

0.1<t<1..... 39

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla I.</b> Datos de Molécula de Octano y otros datos .....	26
<b>Tabla II.</b> Datos de Molécula de Tolueno y otros datos.....	27
<b>Tabla III.</b> Resultados de Simulación en GROMACS.....	32
<b>Tabla IV.</b> Datos del sistema Asfalteno -Agua utilizados para el análisis.....	33
<b>Tabla V.</b> Datos del sistema Asfalteno -Tolueno utilizados para el análisis ...	35
<b>Tabla VI.</b> Datos del sistema Asfalteno -Octano utilizados para el análisis ...	36
<b>Tabla VII</b> Comapración de las constantes de difusión.....	40

**CAPITULO 1**  
**INTRODUCCIÓN**



## **1.1. Preámbulo**

En industria del petróleo una de las mayores causas de obstrucción de medios porosos del yacimiento y las líneas de producción son los Asfaltenos, fracción más pesada del crudo, debido a su precipitación y depositación en las paredes de las tuberías.

El desarrollo de esta investigación, se enfoca en utilizar el software GROMACS para determinar las constantes de difusión de los Asfaltenos en diferentes fluidos, que son: Hidrocarburos Saturados, Hidrocarburos Aromáticos y Agua. Luego de seleccionar la molécula de soluto, se crearon cada uno de los sistemas utilizando el software Avogadro para la simulación principal se utilizó GROMACS.

Finalmente, al procesar los resultados, se obtienen los desplazamientos cuadráticos medios de la molécula de Asfalteno en diferentes intervalos de tiempo, información que se utiliza para hallar las constantes de difusión y así determinar la rapidez con la que se mueve en cada uno de los fluidos.

## **1.2. Planteamiento del problema**

Los asfaltenos, calificados como la fracción más pesada del crudo, se encuentran en suspensión coloidal en el petróleo, a causa de que la superficie de las partículas asfálticas están rodeadas de resinas en forma miscelar. El mayor problema presente en la industria petrolera es la restricción en la recuperación de hidrocarburo debido a la obstrucción de

pozos, líneas de flujo, instalaciones de superficie y formaciones del subsuelo.

A través del simulador (GROMACS) se pretende comprender el comportamiento de esta fracción de hidrocarburo, en cada uno de los otros fluidos presentes, tanto en el yacimiento como en las líneas de producción, con el fin de inferir como podría afectar la composición del hidrocarburo en la formación de obstrucciones.

### **1.3. Justificación**

El fenómeno que ocurre a nivel microscópico en el pozo aun es desconocido para los ingenieros, pero los Asfaltenos en el fondo del pozo por ser la fracción más pesada del crudo, ocasionan problemas por la variación de temperatura y presión. Estos llegan a precipitarse y depositarse causando obstrucciones en las líneas de producción.

El enfoque del proyecto es estudiar el comportamiento de los Asfaltenos en diferentes fluidos: Tolueno, Octano y Agua, a través del cálculo de las constantes de difusión, empleando la herramienta GROMACS, el cual toma la información de topología y geometría de los distintos sistemas generando así los desplazamientos cuadráticos medios en un intervalo de tiempo. Estos datos son procesados para obtener las constantes de difusión, dando así una base para estimar lo que no puede ser perceptible y ocurre en las líneas de producción.

## **1.4. Objetivos**

### **1.4.1. Objetivo General**

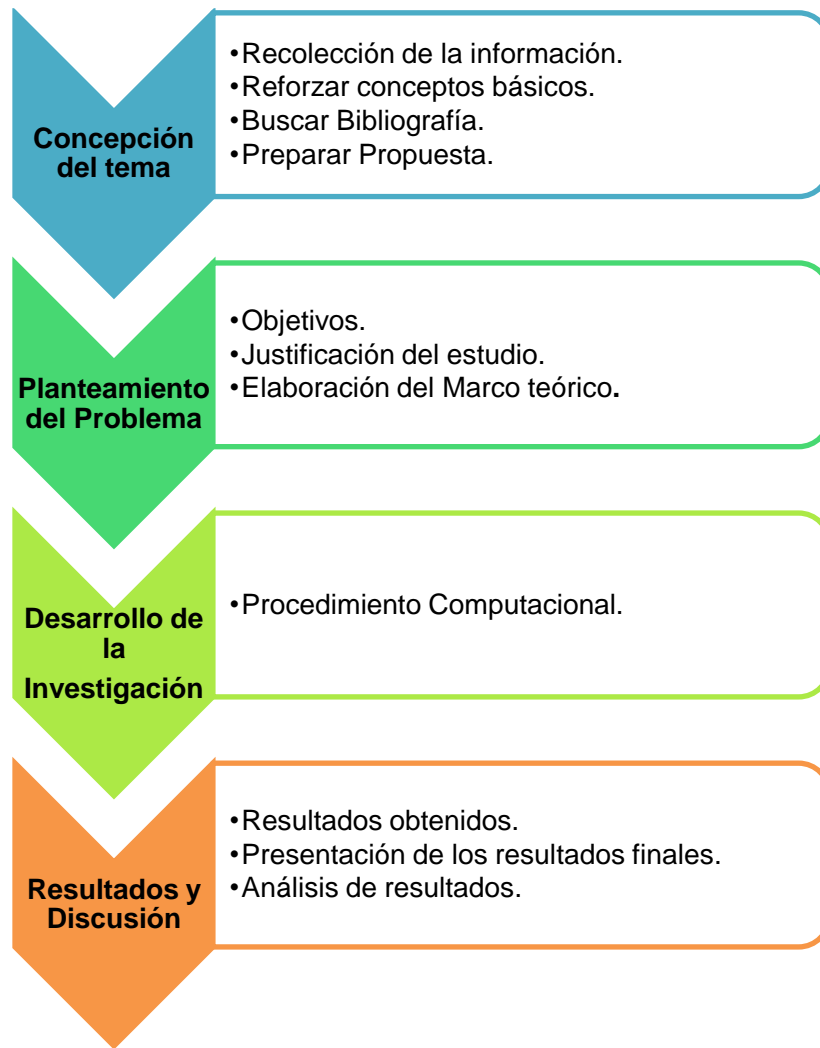
Determinar las constantes de difusividad de una molécula de asfalto en distintos fluidos, mediante procesos de dinámica molecular.

### **1.4.2. Objetivos Específicos**

- Crear los sistemas asfalto-saturados, asfalto-aromáticos y asfalto-agua que se utilizarán en el análisis.
- Evaluar los resultados obtenidos de la simulación.
- Aprender en que periodos de tiempo se da mejor el fenómeno de difusión.
- Comparar los resultados obtenidos.

## **1.5. Metodología**

A continuación, se detalla la metodología de estudio:



**Figura 0.1** Metodología de trabajo

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.

# **CAPÍTULO 2**

## **DESCRIPCIÓN DEL ÁREA DE ESTUDIO**

El enfoque del presente estudio es calcular la constante de difusión de los asfaltenos en diferentes fluidos (hidrocarburos saturados, hidrocarburos aromáticos y agua). En este capítulo se describen cada una de las bases que soportan la investigación, necesarias para comprender el proceso que se realiza.

## **2.1. Simulación Dinámica Molecular**

Muchos aun imaginan a las moléculas como algo rígido o estático, pero ya se conoce que la materia está constituida por partículas en movimiento que interaccionan unas con otras. La física de los materiales está estructurada por cinco diferentes categorías en las que se agrupan los algoritmos computacionales: Aproximaciones de Monte Carlo, Dinámica Molecular, Aproximaciones Variacionales, Cálculo de Desarrollo de Parámetros y Elementos Finitos. (Castañeda & Rivera, 2013)

La dinámica molecular en muchos aspectos es similar a la realización de experimentos en un laboratorio, lo que implica la utilización de protocolos: preparar la muestra que se desea estudiar, conectar el material con un instrumento de medición y finalmente medir las propiedades que intervienen en el proceso. El porcentaje de error dependerá del número de datos que se obtengan al final del proyecto. En una simulación dinámica molecular se sigue el mismo procedimiento. (Daan & Berend, 2002)

## **2.2. Propiedades Dinámicas**

En el empleo de un método de simulación, se pueden calcular las propiedades dinámicas como funciones de correlación temporales. A continuación, se presentan las propiedades que se calculan en la dinámica molecular:

### **2.2.1. Funciones de autocorrelación de velocidades**

La función autocorrelación de velocidades es la medida de la movilidad promedio de una partícula en un sistema al interactuar con sus vecinas. La función es positiva en tiempos cortos, disminuye hasta tomar valores negativos y luego tiende a cero.

Cuando esta función toma valores negativos, los tiempos pertenecen a un régimen donde la partícula se encuentra dentro de una caja formada por sus vecinas, las cuales al colisionar con ella la obligan a cambiar la dirección de su velocidad, en ángulos mayores a  $90^\circ$  y menores de  $270^\circ$  y el producto de las velocidades a distintos tiempos es negativo. Luego la partícula logra salir de la caja y la velocidad ya no está correlacionada o esta correlación disminuye, así la partícula pierde memoria de su velocidad inicial. (Hernández, González, & Rivas, 2010)

### **2.2.2. Desplazamiento Cuadrático Medio**

Esta propiedad es una cantidad promedio para una partícula, se la obtiene calculando el desplazamiento cuadrático para cada partícula

del sistema y se promedia sobre el número total de ellas. Se asocia a la movilidad de una partícula, es empleado para determinar la constante de difusión  $D$ . Correlaciona las posiciones de una partícula a distintos tiempos, a través del cálculo del cuadrado de la distancia media recorrida de un tiempo a otro. En general muestra un comportamiento cuadrático a tiempos cortos y lineales a tiempos largos, a mayor tiempo transcurrido tenemos una distancia cuadrática media mayor entre los tiempos correlacionados, esto indica la movilidad promedio de las partículas. Está ligado a la temperatura del sistema. Al aumentar la temperatura, mayor será la movilidad de las partículas. (Hernández, González, & Rivas, 2010)

## **2.3. Difusión**

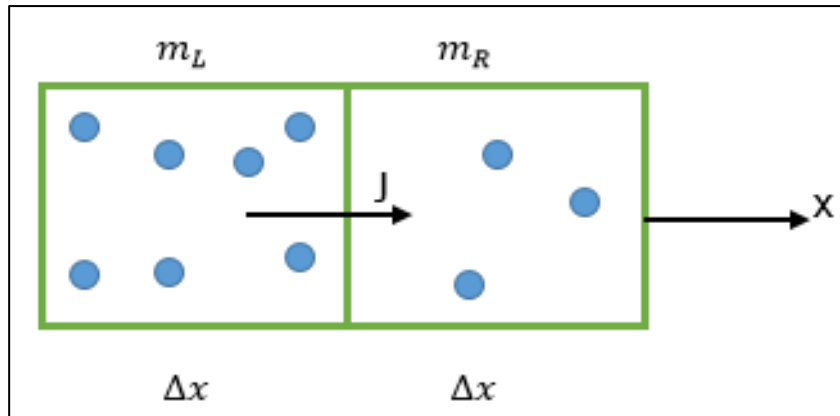
La difusión define como la transferencia o desplazamiento de moléculas a través de un fluido por medio de deslizamientos individuales y desordenados, debido a los gradientes de: concentración, presión, temperatura o por la aplicación de una fuerza externa. Puede ocurrir en sistemas de fluidos estancados o en movimiento. Puesto que se desplazan al azar, la difusión molecular es llamada también como proceso de trayectoria aleatoria. (Masciarelli, Stancich, & Fernando, 2012, pág. 1 y 2)

### **2.3.1. Difusión a nivel macroscópico**

Para poder realizar el análisis correcto a nivel macroscópico, se puede partir desde el punto en que la difusión nace del balance de materia.



Se ha desarrollado una ecuación diferencial basada en elementos diferenciales:



**Figura 0.1** J: Max Flux (Flujo de masa) masa por unidad de tiempo por unidad de área.

**Fuente:** Medina, B., 2017.

Esto permite definir un nuevo concepto: La probabilidad de la masa “m” de cruzar el límite central durante un periodo “ $\Delta t$ ” es igual a “ $\rho$ ”.

Desde este proceso se obtienen los flujos máxicos:

$$J_L = \frac{1}{1 \times 1} \frac{\rho}{\Delta t} m_L : \text{Flujo máxico de izquierda a derecha.}$$

$$J_L = \frac{1}{1 \times 1} \frac{\rho}{\Delta t} m_R : \text{Flujo máxico de derecha a izquierda.}$$

Basándonos en lo anteriormente descrito se deduce flujo máxico

$$\text{efectivo } J = \frac{1}{1 \times 1} \frac{\rho}{\Delta t} (m_L - m_R)$$

Es importante considerar que mientras exista más masa se genera un mayor flujo.

Si se definen las ecuaciones que se detallan a continuación, se puede expresar el flujo en términos de concentración.

$$c = \frac{m}{v} = \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \quad m = cv \therefore J = \frac{\rho}{\Delta t} (m_L - m_R) \quad \text{Ecuación 1.}$$

De esta expresión se simplifica el área:

$$J = \frac{1}{1 \times 1} \frac{\rho}{\Delta t} (c_L - c_R) (\Delta x \times 1 \times 1) \quad \text{Ecuación 2.}$$

De esta expresión se expande  $\Delta x$

$$J = -\frac{\rho}{\Delta t} \Delta c \Delta x ; \quad \text{Ecuación 3.}$$

$$J = -\frac{\rho}{\Delta t} \frac{\Delta x^2}{\Delta x} \Delta c ; \text{ Si la ordenamos} \quad \text{Ecuación 4.}$$

$$J = -\frac{\rho}{\Delta t} \Delta x^2 \frac{\Delta c}{\Delta x} \quad \text{Ecuación 5.}$$

De esta expresión se origina una nueva variable que indica que tan rápido se mueve la masa (en cuadrado de la distancia por unidad de tiempo).

$$D = \rho \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad \text{Ecuación 6.}$$

Por lo que reemplazando en la ecuación (14) en la (13) se tiene

$$J = -D \frac{\Delta c}{\Delta x} \quad \text{Ecuación 7.}$$

Lo que expresado en términos diferenciales

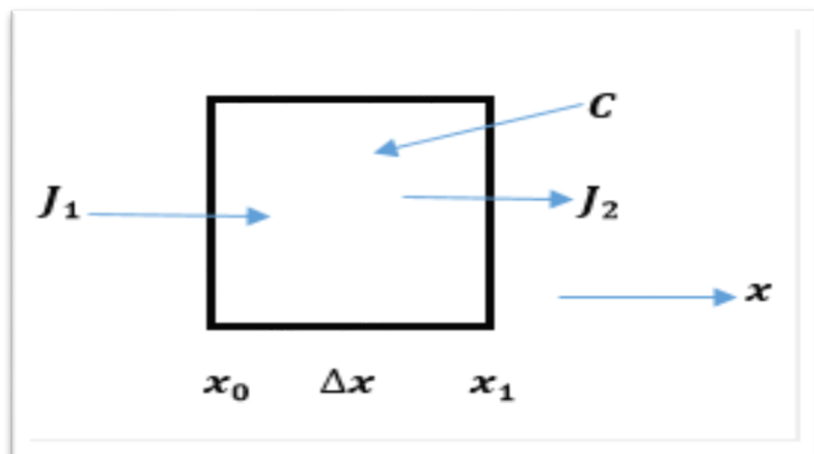
$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad \text{Ecuación 8.}$$

Es así como nace la “Primera Ley de Fick” que define la constante de difusión como la habilidad de la masa de moverse una distancia  $\Delta x^2$  en un tiempo “ $\Delta t$ ”, es importante mencionar que este proceso es estrictamente dependiente de la temperatura.

$$D = \rho \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad \text{Ecuación 9.}$$

### 2.3.2. Segunda Ley de Fick

Según (Juárez, 2015) “Predice como la concentración de una especie cambia con el tiempo. En realidad, la ley de Fick no es más que la ecuación diferencial parcial que expresa la conservación o balance de masa”. (pág. 25)



**Figura 0.2** Transferencia de masa con respecto a x

**Fuente:** Medina, B, 2017.

Partimos de la primera ley de Fick

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad \text{Ecuación 10.}$$

$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = \frac{(J_1 - J_2) \times 1 \times 1}{\Delta X \times 1 \times 1} \quad \text{Ecuación 11.}$$

$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = \frac{(J_1 - J_2)}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x} \left( -D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=x_0} - \left( -D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=x_1} \right) \right) \quad \text{Ecuación 12.}$$

$$J_1 = J_{(x=x_0)} = -D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=x_0} \quad \text{Ecuación 13.}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (J) = -\frac{\partial}{\partial x} \left( -D \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad \text{Ecuación 14.}$$

Lo que esta expresión dice, que el cambio de concentración en el tiempo se iguala a la variación de flujo con respecto a x.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( -D \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad \text{Ecuación 15.}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \left( -D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) \quad \text{(Segunda ley de Fick)} \quad \text{Ecuación 16.}$$

Si se desea resolver esta ecuación, incluso estableciendo condiciones iniciales y de frontera  $C_{x=0} = C_0$  y  $C_{(x>0,t=0)} = 0$ , se necesitan datos para obtener "D" la constante de difusión.

Si se considera lo mencionado anteriormente, sabemos que la dinámica molecular nos ofrece una forma para determinar la constante de difusión a través de las trayectorias.

### 2.3.3. Modelo Atomístico de la difusión

La difusión a escala macroscópica (cambios de concentración), es el resultado de un proceso microscópico, que es el movimiento aleatorio de las partículas. Un modelo atomístico nos permite

calcular directamente la constante de difusión útil para hallar los desplazamientos cuadráticos medios.

Con este antecedente se lo puede relacionar con los conocimientos previos, que:  $D = \rho \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$  es la habilidad de una partícula "N" de moverse una distancia  $\Delta x^2$  sobre un tiempo  $\Delta t$ .

## **2.4. Componentes obtenidos del fraccionamiento del petróleo**

El contenido de asfaltenos es un factor importante en la determinación de los trayectos de procesamiento y refinación de un crudo, se ha desarrollado un método de laboratorio llamado (SARA) para cuantificar su fracción. Esta técnica separa el petróleo muerto o aquel que ha perdido sus componentes gaseosos, en saturados, aromáticos, resinas y asfaltenos, dependiendo de su solubilidad y polaridad. (Akbarzadeh, y otros, 2007)

### **2.4.1. Saturados**

Los hidrocarburos saturados son compuestos químicos que se encuentran formados exclusivamente por átomos de carbono e hidrogeno, son alifáticos ya que todos sus átomos de carbono se encuentran unidos por enlaces simples. También, se los conoce como Alcanos. Insolubles en agua, pero solventes en disolventes orgánicos. (Pérez, Manzano, & Pacheco, 2016)

#### **2.4.2. Aromáticos**

Los hidrocarburos aromáticos son aquellos que tienen las propiedades especiales asociadas con el benceno y están formados por una o más estructuras de benceno estables. Por lo tanto, todos los derivados del benceno siempre que se mantenga intacto el anillo se consideran aromáticos. (Stellman, 1998)

#### **2.4.3. Resinas**

Las resinas son la fracción del crudo que comprende moléculas polares que contienen a su vez heteroátomos como nitrógeno, azufre, y oxígeno. Operacionalmente, las resinas se definen como la fracción del petróleo soluble en alcanos ligeros como n-pentano y n-heptano, pero solubles en propano. Poseen una relación de C/H que oscila entre 1,2-1,7, su estructura es similar a la de los asfaltenos pero su peso molecular es menor que (100 g/mol). (Delgado, 2006, pág. 25)

#### **2.4.4. Asfaltenos**

Los asfaltenos son una clase de componentes de los hidrocarburos. Considerados en la actualidad como insoluble en n-alcanos, tales como n-pentano o el n-heptano, y soluble en tolueno. Los obtenidos de esta manera son sólidos friables, de color oscuro, con una densidad de aproximadamente  $1.2\text{g/cm}^3$ . Además, son infusibles, lo que significa que no poseen un punto de fusión definido, pero se

descomponen frente al calor, dejando un residuo carbonoso.  
(Akbarzadeh, y otros, 2007, pág. 25)

## 2.5. Simulador GROMACS



**Figura 0.3** Logo de GROMACS  
**Fuente:** Software GROMACS

GROMACS se desarrolló por primera vez en el grupo de Herman Berendsen, en el departamento de Química Biofísica de la Universidad de Groningen, y en la actualidad en Estocolmo lo dirige el Laboratorio de la Ciencia para la Vida. Es un código versátil para realizar simulaciones de dinámica molecular, es decir, simular las ecuaciones newtonianas de movimiento para sistemas con cientos o millones de partículas. (Sander , Roland, Per, & Rossen, 2013)

Se emplea este tipo de software en el proyecto, porque es un paquete de licencia libre y permite el cálculo de las interacciones no enlazantes con la diferencia que este es más rápido computacionalmente que otros.

## 2.6. Avogadro



**Figura 0.4** Logo de Avogadro  
**Fuente:** Software Avogadro

El proyecto Avogadro ha desarrollado un avanzado editor y visualizador de moléculas diseñado para química computacional, modelado molecular, bioinformática, ciencia de materias y áreas relacionadas. Sus usos típicos incluyen la construcción de estructuras moleculares, el formato de archivos de entrada, y el análisis de la salida de una amplia variedad de química computacional. Utilizando el formato de archivo CML como su tipo de documento nativo, Avogadro busca mejorar la accesibilidad semántica de los tipos de datos químicos. (Marcus, y otros, 2012)

Se utiliza este software en el proyecto porque su licencia es libre y facilita el diseño de las moléculas, por más complejas o sencillas que estas fueran a diferencia de otros softwares.

## 2.7. Automated Topology Builder (ATB)



**Figura 0.5** Logo de ATB  
**Fuente:** Software ATB

“ATB es una plataforma que fue desarrollada en el año 2011 y en la actualidad se mantiene con el apoyo de la Universidad de Research Council (ARC) y Queensland Cyber Infrastructure Foundation (QCIF)”. (Malde, y otros, 2011)



“El ATB está destinado a facilitar el desarrollo de campos de fuerza atómica para la dinámica molecular o Monte Carlo simulaciones de sistemas biomoleculares”. (Malde, y otros, 2011)

Se recurrió a este software, porque se proporciona de manera gratuita a usuarios de instituciones académicas, se puede crear una cuenta con usuario y contraseña de ESPOL. Provee la topología y la geometría de las moléculas subidas a su plataforma, las compara con otras existentes en su repositorio y genera datos de las que más se aproximan a las características de molécula elaborada en el software Avogadro.

# **CAPÍTULO 3**

## **METODOLOGÍA**

A continuación, se detalla la metodología de estudio:

### **3.1. Procedimiento Computacional**

El procedimiento de investigación fue en esencia computacional, utilizando diferentes plataformas que cumplieron un papel importante para lo que se detalla en este capítulo.

#### **3.1.1. Moléculas empleadas**

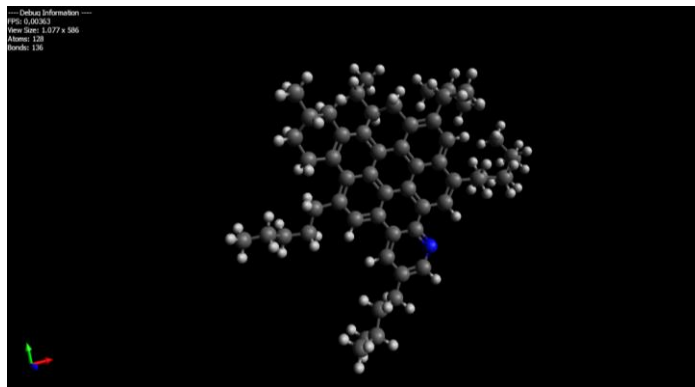
Antes de simular, es necesario determinar que moléculas se van a utilizar en el proceso, es por esto que: de todos los asfaltenos, hidrocarburos saturados e hidrocarburos aromáticos se ha seleccionado aquellos de los que está disponible la información necesaria para el análisis y cuya interacción en el fondo del pozo suceda en casos reales.

Luego de seleccionar cada una de las moléculas a utilizar, su estructura virtual en 3D fue modelada con la ayuda del programa Avogadro, subiendo el archivo que se generó a la plataforma de ATB obtuvimos la información de Topología el archivo con extensión “.top” y Geometría con extensión “.gro” de cada molécula.

##### **3.1.1.1. Molécula de Asfalteno**

La molécula con fórmula química  $C_{56}H_{71}N$ , empleada en el desarrollo del proyecto por tener una estructura menos compleja dentro de los asfaltenos. Utilizando el software

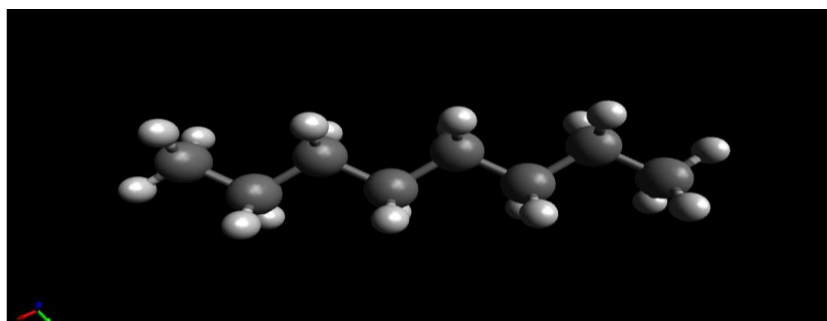
Avogadro se realizó el diseño de la estructura de dicha molécula.



**Figura 0.1** Molécula de asfalteno C<sub>56</sub>H<sub>71</sub>N  
**Fuente:** Software Avogadro

### 3.1.1.2. Molécula de Octano.

La molécula de octano fue elegida en este caso, debido a que entre las cadenas de carbono livianas es la que mejor conserva sus propiedades físicas a condiciones estándar, por lo que las fracciones más pesadas son las que interaccionan con los asfaltenos.

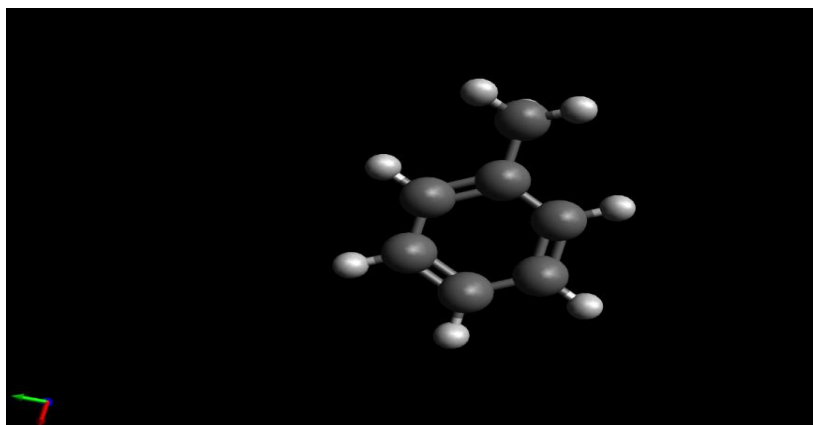


**Figura 0.2** Molécula de hidrocarburo saturado (OCTANO)

**Fuente:** Software Avogadro

### 3.1.1.3. Molécula de Tolueno.

El hidrocarburo aromático que se seleccionó fue el Tolueno, debido a que es empleado como un solvente, ya que estabiliza a los asfaltenos presentes manteniéndolos en suspensión y evitando que se precipiten.



**Figura 0.3** Molécula de hidrocarburo aromático (TOLUENO)

**Fuente:** Software Avogadro.

### 3.1.2. Información de las moléculas.

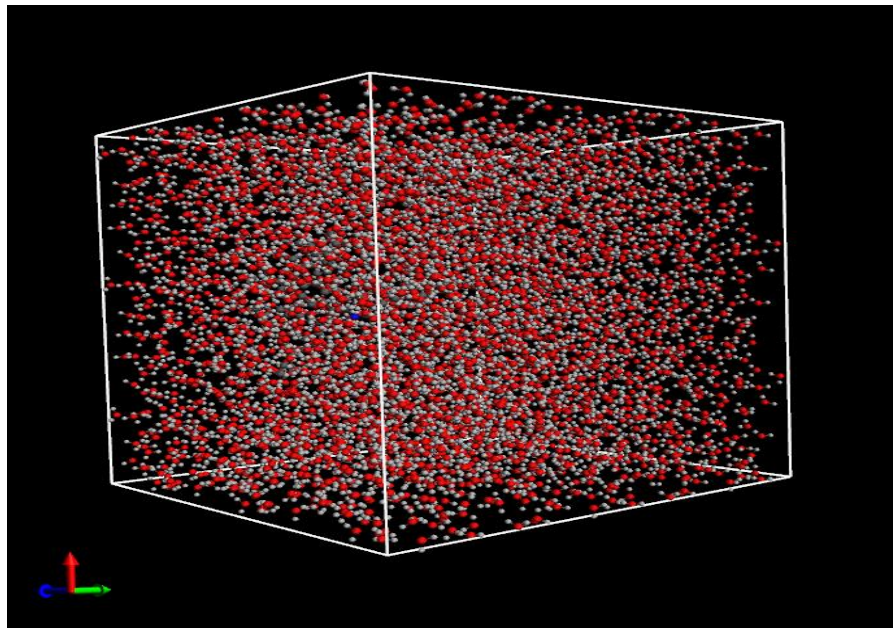
La información de geometría y topología necesaria se obtiene luego del modelamiento de las moléculas en Avogadro, por medio de la plataforma ATB (Automated Topology Builder). El procedimiento realizado se detalla en el Anexo A.

### 3.1.3. Sistemas.

Los sistemas utilizados en el proyecto fueron tres. Luego de contar con la información de las moléculas se procedió a generarlos con la ayuda de software GROMACS, las dimensiones de las celdas de cada uno de ellos fue 5 x 5 x 5 nanómetros. El proceso realizado para cada uno se especifica en el Anexo B.

### 3.1.3.1. Sistema Asfalteno – Agua.

El sistema Asfalteno-Agua creado en GROAMCS está conformado por 1 molécula de asfalteno y 4250 moléculas de agua.



**Figura 0.4** Celda llena de agua y una molécula de asfalteno

**Fuente:** Software Avogadro

### 3.1.3.2. Sistema Asfalteno – Octano.

En el sistema Asfalteno – Octano fue necesario calcular el número de moléculas del solvente que cabían en la caja, para lo que se utilizaron los datos de la tabla I.

**Tabla I.** Datos de Molécula de Octano y otros datos

Densidad ( $gr/cm^3$ )	<b>0,703</b>
Masa molar ( $gr/mol$ )	114,23
Numero de Avogadro	$6,022 \times 10^{23}$
Factor de conversión de $nm^3$ a $cm^3$	$1 \times 10^{-21}$
Volumen ( $nm^3$ )	125

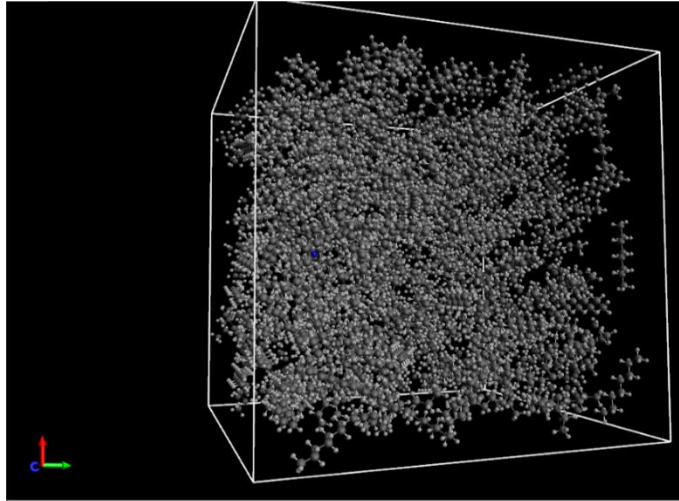
**Fuente:** Coteria, W., Rodríguez, K., 2017.

El número de moléculas de Octano que habrá dentro de la celda son:

$$125nm^3 \times \frac{1 \times 10^{-21}cm^3}{1nm^3} \times \frac{0,703gr}{1cm^3} \times \frac{1mol}{114,23gr} \times \frac{6,022 \times 10^{23}moleculas}{1mol}$$

$$= 463,23 moleculas \approx 464moleculas$$

El sistema Asfalteno-Octano creado en GROAMCS está conformado por 1 molécula de asfalteno y 464 moléculas de Octano.



**Figura 0.5** Sistema Asfalteno - Octano

**Fuente:** Software Avogadro.

### 3.1.3.3. Sistema Asfalteno – Tolueno.

En el sistema Asfalteno – Tolueno fue necesario calcular el número de moléculas del solvente que cabían en la caja, para lo que se utilizaron los datos de la tabla II.

**Tabla II.** Datos de Molécula de Tolueno y otros datos

Densidad ( $\text{gr}/\text{cm}^3$ )	<b>0,867</b>
Masa molar ( $\text{gr}/\text{mol}$ )	92,14
Numero de Avogadro	$6,022 \times 10^{23}$
Factor de conversión de $\text{nm}^3$ a $\text{cm}^3$	$1 \times 10^{-21}$
Volumen ( $\text{nm}^3$ )	125

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.

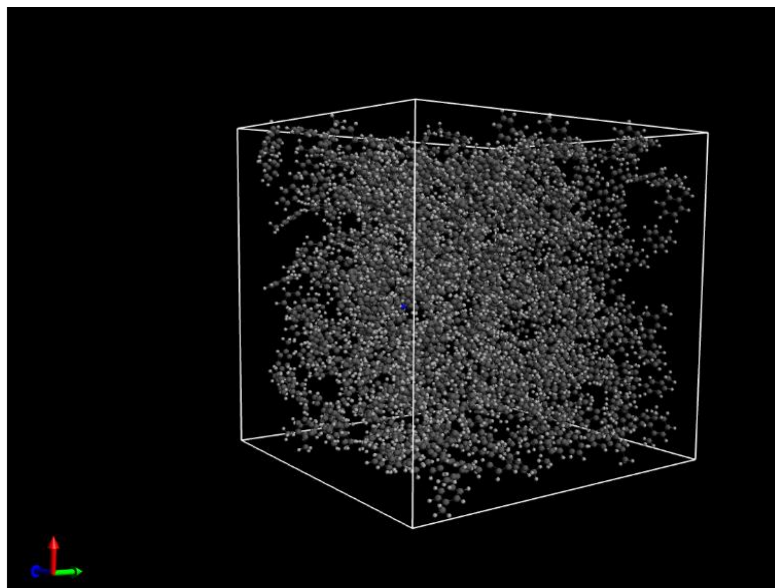
El número de moléculas de Tolueno que cabrán en una celda son:



$$125\text{nm}^3 \times \frac{1 \times 10^{-21}\text{cm}^3}{1\text{nm}^3} \times \frac{0,867\text{gr}}{1\text{cm}^3} \times \frac{1\text{mol}}{92,14\text{gr}} \times \frac{6,022 \times 10^{23}\text{moleculas}}{1\text{mol}}$$

$$= 624,16\text{moléculas} \approx 625\text{moléculas}$$

El sistema Asfalteno-Tolueno creado en GROMACS está conformado por 1 molécula de asfalteno y 625 moléculas de Tolueno.



**Figura 0.6** Celda de tolueno y asfalteno combinadas

**Fuente:** Software Avogadro.

#### 3.1.4. Minimización

La minimización consiste en variar la geometría de las estructuras dentro de los sistemas creados anteriormente, de forma que la energía dentro de cada uno disminuye progresivamente, llegando a

alcanzar un mínimo local o global en la superficie de energía potencial. (Figuroa, 2015)

Esto se realiza con el fin de que las condiciones iniciales del sistema antes de simular sean más parecidas al estado de los fluidos dentro de las líneas de producción.

La minimización de los sistemas se realizó en 100000 pasos.

### **3.1.5. Simulación**

Para cada sistema se realizaron dos simulaciones, es decir que en total se ejecutaron seis. Fue necesario dar velocidad a las moléculas de los sistemas, por esta razón se estableció una temperatura de 300°K, presión de 1 atm y un proceso isotrópico.

La simulación se realizó en 1000000 pasos con una variación entre pasos de 0.001 segundos.

### **3.1.6. Resultados.**

La información obtenida de las simulaciones consistía en un archivo de extensión “.trr” que posee las coordenadas de la molécula de asfaleno en el sistema correspondiente. Estas posiciones son dadas en código binario, forma en la que no es posible usarlas directamente, por esta razón fue necesario transformarlas usando

comando "g\_traj" y obteniendo como resultado un archivo con extensión ".xvg".

Finalmente para generar los desplazamientos cuadráticos medios en distintos intervalos de tiempo, se empleó el programa difusionRPV.exe.

### **3.1.7. Procesamiento de datos y cálculos.**

Los datos finales fueron copiados a una hoja de cálculo de Excel, donde se analizaron los desplazamientos cuadráticos medios de la molécula de Asfalteno a la temperatura de 300°K, presión de 1 atm y se obtuvieron las constantes de difusión.

En cada caso se consiguieron dos listas de datos, gracias a esto la información ingresada en la hoja de cálculo se promedió, dando como resultado una serie de gráficas correspondientes a los datos en intervalos de tiempo de un segundo. De igual forma dio una gráfica promedio, la cual muestra el comportamiento general que tuvo la molécula de asfalteno durante toda la simulación. La pendiente de esta grafica corresponde a la constante de difusión del asfalteno en el sistema.

# **CAPÍTULO 4**

## **ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS**

En el siguiente capítulo se presentan los resultados obtenidos en nuestra investigación, la interpretación de los mismos y el análisis correspondiente.

Los datos obtenidos de la simulación luego de haber sido convertidos del código binario y filtrados quedaron como se muestra en la tabla III, donde se puede observar el tiempo en el que fue obtenido, el número de dato, el desplazamiento cuadrático medio (DCM) en tres y en dos dimensiones y los errores medios.

**Tabla III.** Resultados de Simulación en GROMACS

Tiempo	Dato #	DCM3D	DCM 2D	Error 3D	Error 2D
0.00100	100000.00000	0.00030	0.00020	4.63E-07	4.54E-07
0.00200	99999.00000	0.00050	0.00040	4.49E-07	4.42E-07
0.00300	99998.00000	0.00080	0.00050	4.44E-07	4.35E-07
0.00400	99997.00000	0.00110	0.00070	4.40E-07	4.31E-07
0.00500	99996.00000	0.00130	0.00090	4.38E-07	4.29E-07
0.00600	99995.00000	0.00160	0.00100	4.37E-07	4.28E-07
0.00700	99994.00000	0.00180	0.00120	4.36E-07	4.27E-07
0.00800	99993.00000	0.00210	0.00140	4.34E-07	4.25E-07
0.00900	99992.00000	0.00230	0.00150	4.33E-07	4.24E-07
0.01000	99991.00000	0.00260	0.00170	4.31E-07	4.22E-07
0.01100	99990.00000	0.00280	0.00190	4.30E-07	4.21E-07
0.01200	99989.00000	0.00310	0.00200	4.28E-07	4.19E-07
0.01300	99988.00000	0.00330	0.00220	4.26E-07	4.18E-07
0.01400	99987.00000	0.00360	0.00230	4.25E-07	4.16E-07
0.01500	99986.00000	0.00380	0.00250	4.23E-07	4.15E-07

**Fuente:** Software GROMACS.

De estos resultados los que fueron utilizados el tiempo y el Desplazamiento Cuadrático Medio en tres dimensiones (DCM 3D) para construir las gráficas de DCM vs t para cada uno de los sistemas.

De cada sistema se realizaron dos simulaciones y cada una de ellas contó con un total de diez mil datos. Los resultados de las simulaciones para cada sistema

fueron promediados y así llegar a una mejor aproximación de la constante de difusión. A continuación, se encuentran los análisis correspondientes.

#### 4.1. Sistema Asfalteno-Agua

La Tabla III muestra el esquema que se generó en Excel para el uso de los datos de este sistema.

**Tabla IV.** Datos del sistema Asfalteno -Agua utilizados para el análisis

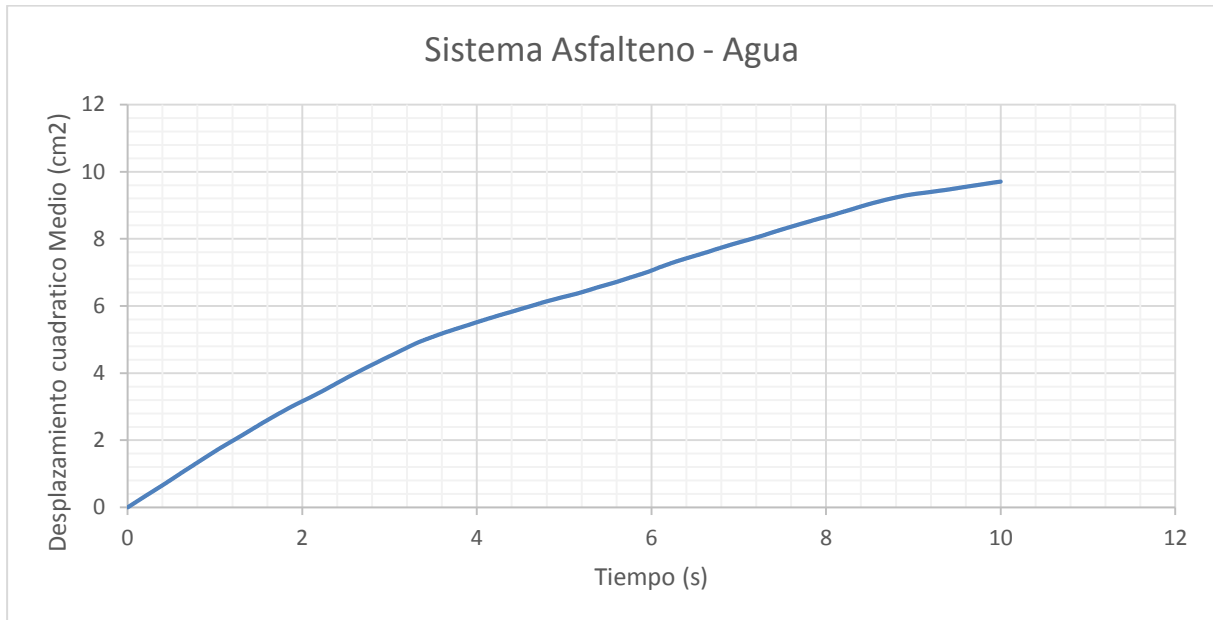
Tiempo	Sim 1	Sim 2	Promedio
0.00100	0.00030	0.00330	0.00180
0.00200	0.00050	0.00650	0.00350
0.00300	0.00080	0.00960	0.00520
0.00400	0.00110	0.01270	0.00690
0.00500	0.00130	0.01580	0.00855
0.00600	0.00160	0.01890	0.01025
0.00700	0.00180	0.02200	0.01190
0.00800	0.00210	0.02500	0.01355
0.00900	0.00230	0.02810	0.01520
0.01000	0.00260	0.03110	0.01685
0.01100	0.00280	0.03420	0.01850

**Fuente:** Software GROMACS

Una vez que el promedio ha sido calculado se obtuvieron las gráficas correspondientes a los desplazamientos cuadráticos medios en tres dimensiones con respecto al tiempo.

En la Figura 4.1 se puede observar la tendencia del movimiento de la molécula de asfalteno en el agua con el paso del tiempo, a pesar de que se podría considerar que el periodo estimado es muy corto, se observa cómo se comporta el soluto poco antes de los cuatro segundos, este deja su patrón de movimiento y a medida que el tiempo avanza disminuyendo su razón de

desplazamiento. Por esta razón se considera el intervalo de 0 a 1 segundos para realizar el cálculo de la pendiente, visto que a tiempos tempranos el fenómeno de difusión es más evidente.



**Figura 0.1** DCM 3D vs Tiempo Sistema Asfáltico-Agua.

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.

## 4.2. Sistema Asfalteno-Tolueno

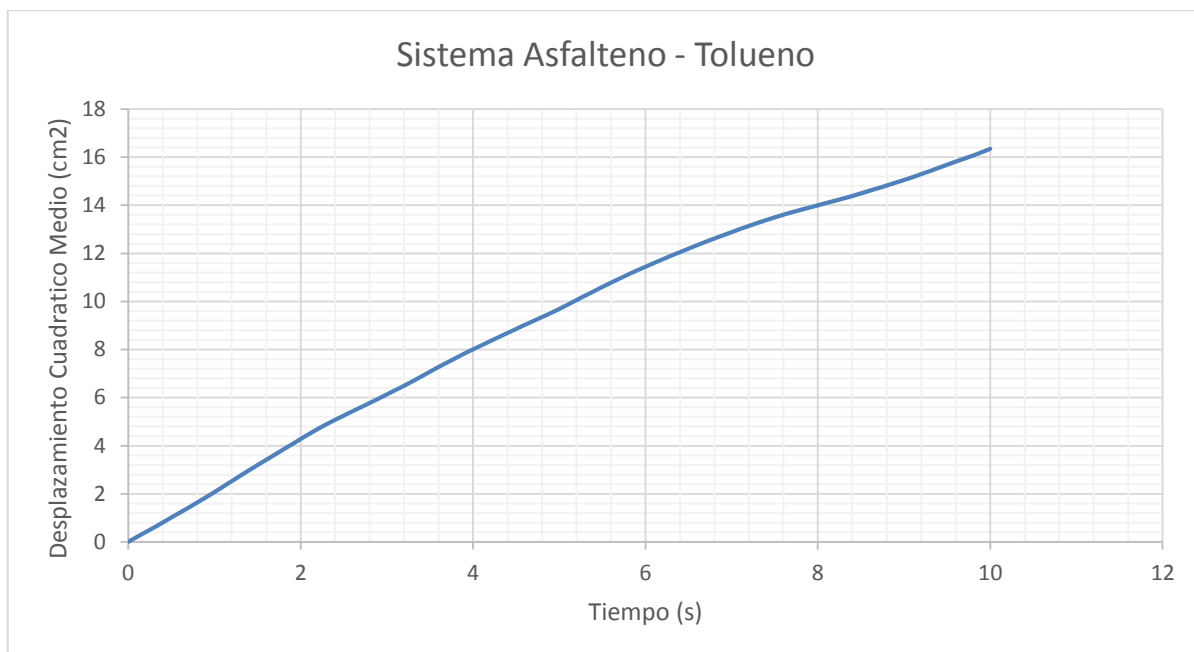
**Tabla V.** Datos del sistema Asfalteno -Tolueno utilizados para el análisis

Tiempo	Sim 1	Sim 2	Promedio
0.00100	0.00300	0.00280	0.00290
0.00200	0.00590	0.00550	0.00570
0.00300	0.00880	0.00830	0.00855
0.00400	0.01150	0.01080	0.01115
0.00500	0.01410	0.01320	0.01365
0.00600	0.01660	0.01550	0.01605
0.00700	0.01900	0.01770	0.01835
0.00800	0.02120	0.01980	0.02050
0.00900	0.02350	0.02180	0.02265
0.01000	0.02570	0.02380	0.02475
0.01100	0.02780	0.02580	0.02680

**Fuente:** Software GROMACS

La Figura 4.2 corresponde al sistema Asfalteno – Tolueno. En ella se puede observar que los desplazamientos cuadráticos medios con respecto al tiempo tienen una tendencia similar al sistema Asfalteno – Agua, pero la difusión se presenta de forma más lineal que el caso anterior después de los tres segundos y en este caso el soluto tiene mayor movimiento dentro del fluido, lo que se esperaba ya que el Tolueno posee una menor viscosidad y densidad que el agua, características que son primordiales en la difusión para una difusión más rápida.





**Figura 0.2** DCM 3D vs Tiempo Sistema Asfalteno – Tolueno

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.

### 4.3. Sistema Asfalteno-Octano

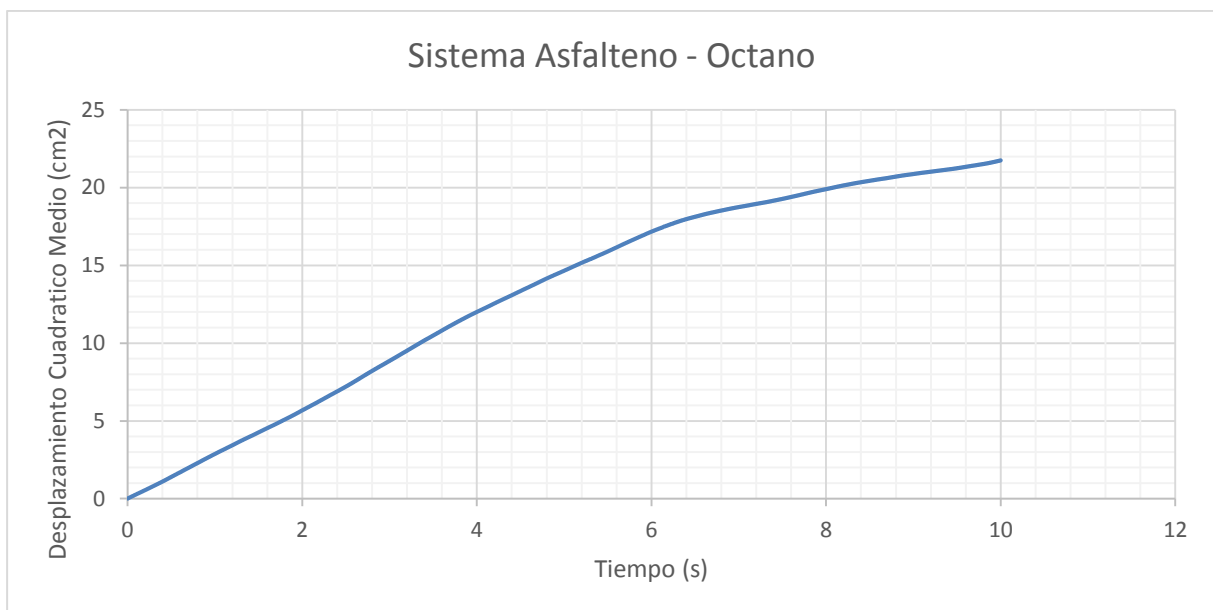
**Tabla VI.** Datos del sistema Asfalteno -Octano utilizados para el análisis

Tiempo	Sim 1	Sim 2	Promedio
0.00100	0.00320	0.00470	0.00395
0.00200	0.00640	0.00900	0.00770
0.00300	0.00970	0.01330	0.01150
0.00400	0.01280	0.01750	0.01515
0.00500	0.01580	0.02140	0.01860
0.00600	0.01880	0.02520	0.02200
0.00700	0.02170	0.02880	0.02525
0.00800	0.02450	0.03240	0.02845
0.00900	0.02730	0.03580	0.03155
0.01000	0.03000	0.03910	0.03455
0.01100	0.03270	0.04240	0.03755

**Fuente:** Software GROMACS

La Figura 4.4 corresponde al comportamiento de la molécula de asfalteno en el octano, al igual que en la Figura 4.3 se puede observar que la curva tiene

una tendencia lineal la mayor parte del tiempo y si se comparan los desplazamientos cuadráticos medios con la Figura 4.2 y Figura 4.3 es evidente que este sistema presenta los valores mayores, lo cual era de esperarse ya que de los tres solventes utilizados para este estudio, el octano es el que menor viscosidad y densidad presenta, lo que permite que las moléculas de soluto se desplacen con mayor facilidad dentro del fluido.



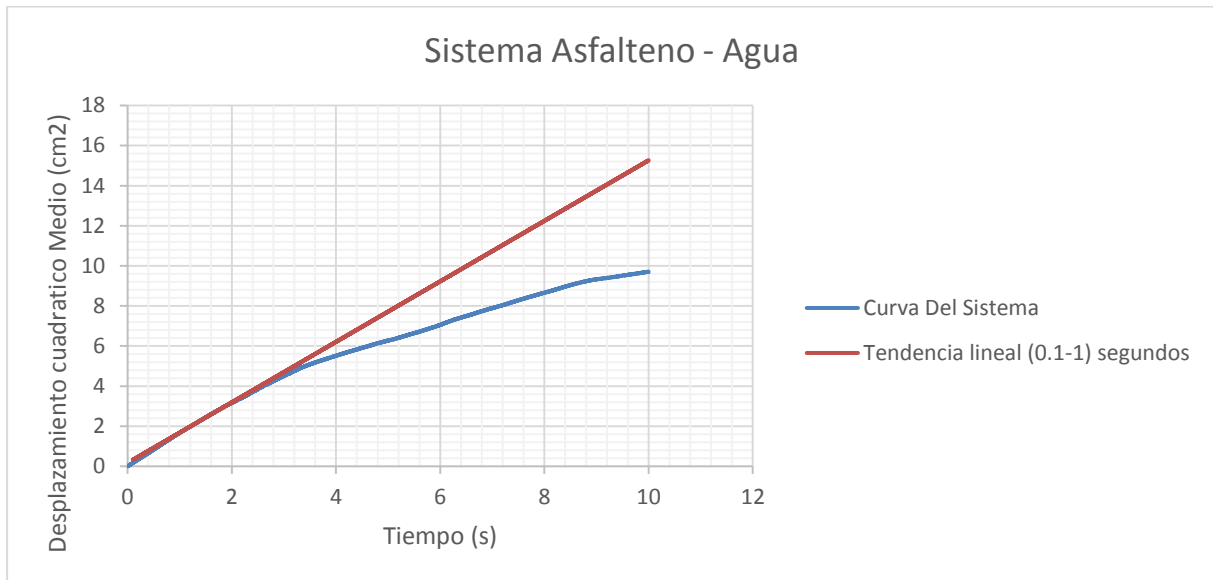
**Figura 0.3** DCM 3D vs Tiempo Sistema Asfalteno – Octano

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.

#### 4.4. Constantes de difusión

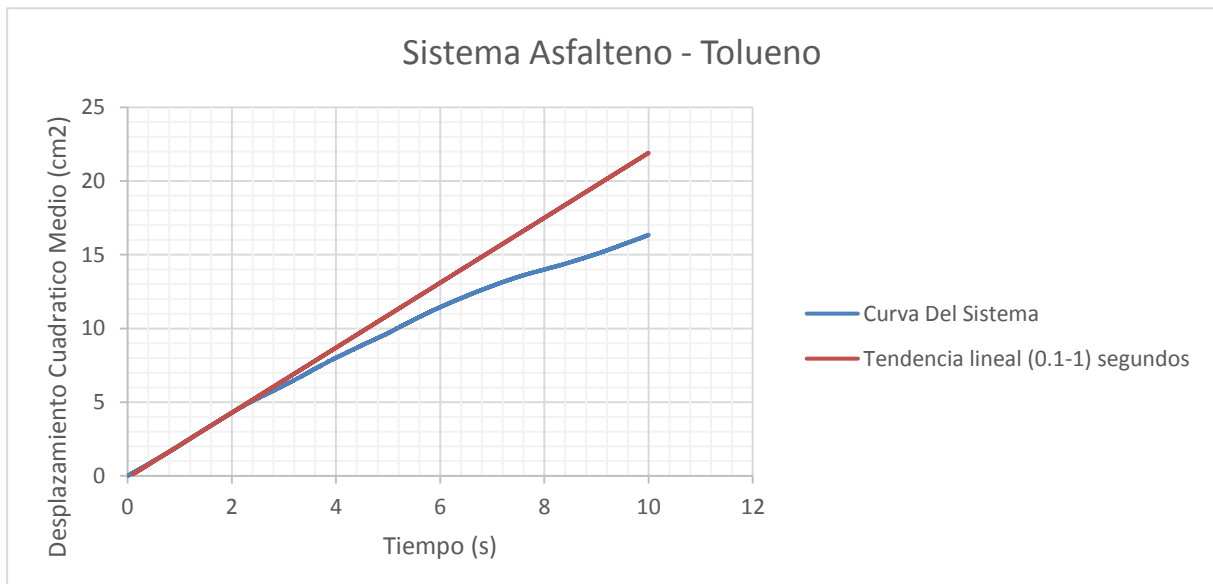
Para determinar el coeficiente de difusión en cada caso fue necesario considerar un periodo de tiempo en el cual el fenómeno fuera más evidente, es por esto que, del tiempo de 0 a 10 segundos, se utilizaron los datos de 0.1 a 1 segundos. Para cada uno de los casos mostrados en Figura 4.4, Figura 4.5 y Figura 4.6 se trazó una recta correspondiente a la tendencia lineal de

este rango de datos y cuya pendiente fue el dato necesario para encontrar el valor que se deseaba.



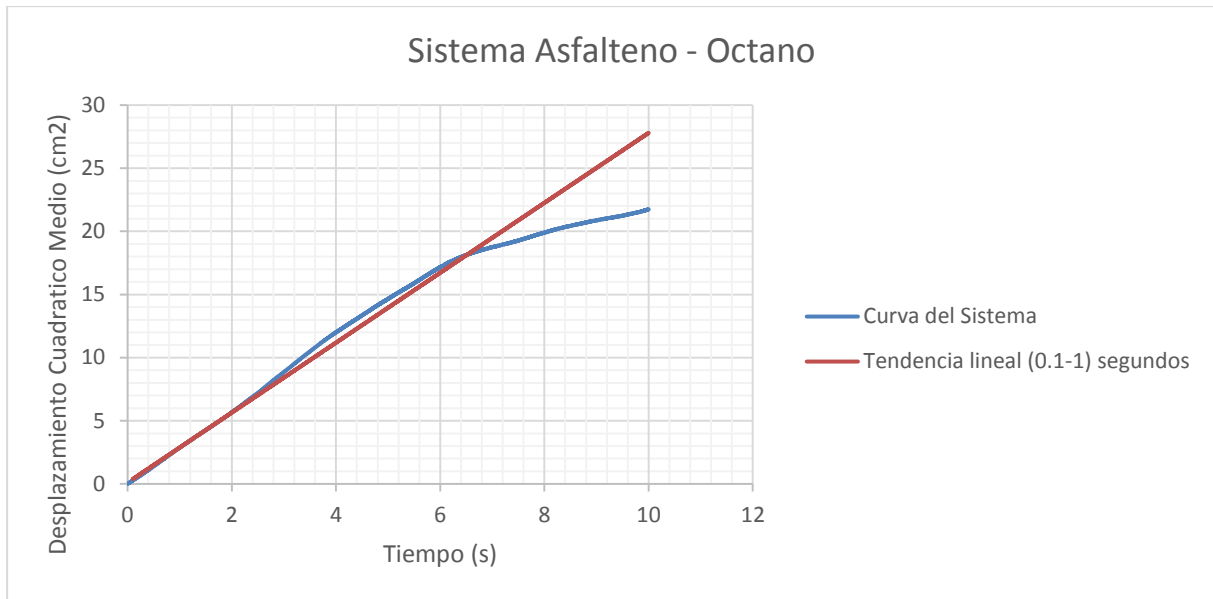
**Figura 0.4** Sistema Asfáltico - Agua, recta para el cálculo de la pendiente  $0.1 < t < 1$ .

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.



**Figura 0.5** Sistema Asfáltico - Tolueno, recta para el cálculo de la pendiente  $0.1 < t < 1$ .

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.



**Figura 0.6** Sistema Asfalteno - Octano, recta para el cálculo de la pendiente  $0.1 < t < 1$

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.

Se ha considerado colocar los valores de densidad y viscosidad de cada uno de los fluidos utilizados en este proyecto para que sea posible entender la razón de movimiento de las moléculas según como varían estos valores los cuales se detallan en la Tabla VII.

En la Tabla VII los valores de la constante de difusión son inversamente proporcionales a la Densidad y viscosidad, si se compara, entre menos viscoso y denso sea un fluido, las moléculas dentro de él se podrán desplazar una mayor distancia en un mismo tiempo.

**Tabla VII** Comparación de las constantes de difusión.

<b>Fluido</b>	<b>Pendiente (cm<sup>2</sup>/s)</b>	<b>Densidad (Kg/cm<sup>3</sup>)</b>	<b>Viscosidad (cp)</b>	<b>Constantes de difusión del Asfalteno (cm<sup>2</sup>/s)</b>
<b>Agua</b>	1.675623576	1000.0	1.000	2.79× 10 <sup>-6</sup>
<b>Tolueno</b>	2.069570818	866.9	0.590	3.45× 10 <sup>-6</sup>
<b>Octano</b>	2.910927665	703.0	0.542	4.85× 10 <sup>-6</sup>

**Fuente:** Cotera, W., Rodríguez, K., 2017.

# **CAPÍTULO 5**

## **CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

## CONCLUSIONES

A tiempos tempranos el fenómeno de difusión es más evidente, a medida que avanza el tiempo la molécula dentro del fluido pierde velocidad lo que se resume en desplazamientos más cortos.

La variación de la viscosidad y densidad del fluido, afectan el valor de la constante de difusividad ya que tienen una relación inversamente proporcional, lo que se puede comprobar en los resultados obtenidos.

Dependiendo del valor de difusión calculado se puede decir que, la composición del crudo afecta a la movilidad de sus componentes.

De los tres sistemas, el de octano es el más favorable, porque permite una mayor movilidad de las moléculas de Asfalteno.

El sistema Asfalteno – Agua fue el menos favorable, porque de los tres, es el permite menor movilidad de las moléculas de asfalteno.

Una combinación de fluidos como tolueno y octano harán un mejor barrido de los Asfaltenos adheridos a las líneas de producción, limpiando las tuberías en un menor tiempo.

La rapidez con la que se da el fenómeno de difusión está condicionada al tamaño de la muestra, si esta es de mayor tamaño la difusión tomara más tiempo.

## **RECOMENDACIONES**

Se debe tomar la mayor cantidad de datos en la simulación para obtener un porcentaje de error más bajo.

Verificar que las corridas en las computadoras se realicen de forma eficiente, esto es verificando la fecha de inicio y de finalización de cada simulación.

El tiempo que toma cada simulación depende de factores como, la calidad de los equipos utilizados para el proceso o el sistema que se va a simular.



# **ANEXOS**

## Anexo A

### INFORMACIÓN DE LAS MOLÉCULAS

**Paso 1:** Subida del Archivo a Plataforma ATB.

El archivo generado de Avogadro en formato “.pdb”, se sube a la plataforma de ATB ingresando los parámetros mostrados en la imagen que son:

- Tipo de Molécula: Heteromolecula.
- Carga neta: 0 (Ya que la molécula es un compuesto estable)

Luego se subió el archivo, haciendo click en next .

**Paso 2:** Selección de Molécula.

Las opciones de las moléculas que existen, se muestran en la plataforma y tienen la misma composición de la que se ha subido. De estas se procede a elegir la que tiene la estructura similar a la modelada en Avogadro, se la guarda haciendo click en *Add to Saved Molecules* y se selecciona *Show Molecule Page* para ver la información que posee la plataforma de la molécula de interés.

**Paso 3:** Descarga de información de Topología y Geometría de moléculas de estudio.

La plataforma ATB presenta dos opciones llamadas Topology Files y Structure Files de las cuales se seleccionan solo dos, uno de ellos es la Topología de la molécula (GROMACS All-atom) y el otro su geometría (All-atom PBD optimised geometry).

# INFORMACIÓN DE LA MOLÉCULA DE ASFALTENO.

## Paso 1:

Submit Molecule to Automated Topology Builder: version 2.2

(\*) Denotes required information

\*Molecule type  
heteromolecule

\*Net charge (q)  
0  
Ex: 0, -1, 1, -15

\*Coordinates  
Coordinate data can be provided in one of 4 ways:

1. Draw/Modify Molecule with JSMOL and JSME
2. Provide SMILES
3. Upload PDB file:  
Browse... C56H71N1.pdb
4. Paste PDB:

NOTE: all hydrogen atoms must be included!

Reset Next

**Figura 1.** Interfaz para subir el archivo de Avogadro (Asfalteno) a ATB. Fuente: (Koziara, M, Malde, & Mark, 2011)

## Paso 2:

The following 2 conformations of this molecule were found in our database:

**RMSD: 5.287 Å**

Fig 1. Click to toggle size.

Formula	C <sub>56</sub> H <sub>71</sub> N	Show Molecule Page
Atoms	128	Add to Saved Molecules
Netcharge	0	Preview in 3D
Molid	224321	

**RMSD: 5.546 Å**

Fig 1. Click to toggle size.

Formula	C <sub>56</sub> H <sub>71</sub> N	Show Molecule Page
Atoms	128	Add to Saved Molecules
Netcharge	0	Preview in 3D
Molid	23145	

**Important!**  
If none of these conformation match your molecule, you can try submitting a new one.  
Note that there is not added interest in adding the same conformation twice.

Submit New Conformation

**Figura 2.** Opciones de la molécula de asfalteno subida según su estructura en ATB.

### Paso 3:

Molecular Dynamics (MD) Files Flag Topology

Topology History

HEAD (Wed Jun 14 15:25:37 2011)

GROMACS Files

Topology Files	Structure Files
GROMACS G54A7FF All-Atom (ITP file)	All-Atom PDB (optimised geometry)
GROMACS G54A7FF United-Atom (ITP file)	All-Atom PDB (original geometry)
	United-Atom PDB (optimised geometry)
	United-Atom PDB (original geometry)

Charge Group Distribution:

Graph representation of charge group distribution. Click to toggle size.

Fig 2. Graph representation of charge group distribution. Click to toggle size.

Equivalent Atoms (Molecular Symmetry):




Fig 3. Equivalent atoms within the molecule as predicted by the ATB algorithm. Atom name and unique equivalence class integer code (in brackets) is

**Figura 3.** Opciones de descarga en ATB para GROMACS. Fuente:

(Koziara, M, Malde, & Mark, 2011)

HEADER	UNCLASSIFIED	14-Jun-17						
TITLE	ALL ATOM STRUCTURE FOR MOLECULE UNL							
AUTHOR	GRMOS AUTOMATIC TOPOLOGY BUILDER REVISION 2017-05-09 11:22:47							
AUTHOR	2 http://compbio.biosci.uq.edu.au/atb							
HETATM	1 H1 V8WL	0	3.971	-6.137	0.325	1.00	0.00	H
HETATM	2 C2 V8WL	0	3.780	-5.323	1.050	1.00	0.00	C
HETATM	3 H2 V8WL	0	4.485	-5.327	1.852	1.00	0.00	H
HETATM	4 C4 V8WL	0	3.726	-3.986	0.332	1.00	0.00	C
HETATM	5 H4 V8WL	0	4.352	-3.275	0.939	1.00	0.00	H
HETATM	6 H3 V8WL	0	4.251	-4.153	-0.649	1.00	0.00	H
HETATM	7 C5 V8WL	0	2.415	-3.326	0.066	1.00	0.00	C
HETATM	8 C8 V8WL	0	2.376	-1.924	-0.200	1.00	0.00	C
HETATM	9 C11 V8WL	0	3.510	-1.124	-0.591	1.00	0.00	C
HETATM	10 C16 V8WL	0	4.721	-1.749	-1.199	1.00	0.00	C
HETATM	11 H13 V8WL	0	5.480	-2.126	-0.387	1.00	0.00	H
HETATM	12 H12 V8WL	0	4.391	-2.627	-1.819	1.00	0.00	H
HETATM	13 C17 V8WL	0	5.521	-0.825	-2.100	1.00	0.00	C
HETATM	14 H15 V8WL	0	4.822	-0.271	-2.781	1.00	0.00	H
HETATM	15 H14 V8WL	0	6.067	-0.965	-1.481	1.00	0.00	H
HETATM	16 C18 V8WL	0	6.524	-1.586	-2.943	1.00	0.00	C
HETATM	17 H17 V8WL	0	6.088	-2.423	-3.484	1.00	0.00	H
HETATM	18 H16 V8WL	0	6.335	-0.892	-3.725	1.00	0.00	H
HETATM	19 C19 V8WL	0	7.670	-2.142	-2.126	1.00	0.00	C
HETATM	20 H19 V8WL	0	8.167	-1.309	-1.562	1.00	0.00	H
HETATM	21 H18 V8WL	0	7.271	-2.864	-1.364	1.00	0.00	H
HETATM	22 C20 V8WL	0	8.683	-2.838	-2.998	1.00	0.00	C
HETATM	23 H22 V8WL	0	8.209	-3.680	-3.558	1.00	0.00	H
HETATM	24 H21 V8WL	0	9.120	-2.127	-3.740	1.00	0.00	H
HETATM	25 H20 V8WL	0	9.512	-3.252	-2.375	1.00	0.00	H
HETATM	26 C12 V8WL	0	3.440	0.243	-0.493	1.00	0.00	C
HETATM	27 H11 V8WL	0	4.321	0.850	-0.749	1.00	0.00	H
HETATM	28 C14 V8WL	0	2.244	0.924	-0.127	1.00	0.00	C
HETATM	29 C24 V8WL	0	2.212	2.353	0.026	1.00	0.00	C
HETATM	30 C25 V8WL	0	3.388	3.145	-0.088	1.00	0.00	C
HETATM	31 H23 V8WL	0	4.373	2.672	-0.130	1.00	0.00	H
HETATM	32 C26 V8WL	0	3.309	4.518	0.129	1.00	0.00	C
HETATM	33 C28 V8WL	0	4.515	5.384	0.099	1.00	0.00	C
HETATM	34 H26 V8WL	0	5.226	5.007	-0.686	1.00	0.00	H
HETATM	35 H25 V8WL	0	4.224	6.429	-0.192	1.00	0.00	H
HETATM	36 C29 V8WL	0	5.215	5.412	1.445	1.00	0.00	C
HETATM	37 H28 V8WL	0	4.498	5.788	2.222	1.00	0.00	H
HETATM	38 H27 V8WL	0	5.507	4.370	1.738	1.00	0.00	H
HETATM	39 C30 V8WL	0	6.449	6.303	1.430	1.00	0.00	C
HETATM	40 H32 V8WL	0	6.192	7.261	0.895	1.00	0.00	H
HETATM	41 C32 V8WL	0	6.858	6.645	2.849	1.00	0.00	C
HETATM	42 H35 V8WL	0	7.092	5.716	3.422	1.00	0.00	H
HETATM	43 H34 V8WL	0	7.766	7.296	2.843	1.00	0.00	H
HETATM	44 H33 V8WL	0	6.036	7.187	3.374	1.00	0.00	H
HETATM	45 C31 V8WL	0	7.681	5.643	0.781	1.00	0.00	C
HETATM	46 H31 V8WL	0	7.324	5.423	-0.357	1.00	0.00	H
HETATM	47 H30 V8WL	0	8.493	6.315	0.701	1.00	0.00	H
HETATM	48 H29 V8WL	0	7.883	4.684	1.200	1.00	0.00	H
HETATM	49 C27 V8WL	0	2.015	0.990	0.305	1.00	0.00	C
HETATM	50 H24 V8WL	0	1.905	6.186	0.409	1.00	0.00	H
HETATM	51 N1 V8WL	0	0.894	4.386	0.358	1.00	0.00	N
HETATM	52 C23 V8WL	0	0.968	3.018	0.231	1.00	0.00	C
HETATM	53 C22 V8WL	0	-0.249	2.232	0.318	1.00	0.00	C
HETATM	54 C33 V8WL	0	-1.511	2.865	0.514	1.00	0.00	C
HETATM	55 H36 V8WL	0	-1.553	3.966	0.561	1.00	0.00	H

Figura 4. Datos de Topología de la molécula de Asfalteno. Fuente: (Malde, y otros, 2011)

```

-----TITLE-----
; None
;
; This file was generated at 15:25 on 2017-06-14 by
;
; Automatic Topology Builder
;
; REVISION 2017-05-09 11:22:47
;
; Authors : Alpeshkumar K. Malde, Le Zuo, Matthew Breeze, Martin Stroet, Alan E. Mark
;
; Institute : Molecular Dynamics group,
; School of Chemistry and Molecular Biosciences (SCMB),
; The University of Queensland, QLD 4072, Australia
;
; URL : http://compbio.biosci.uq.edu.au/atb
; Citation : Malde AK, Zuo L, Breeze M, Stroet M, Poger D, Nair PC, Oostenbrink C, Mark AE.
; An Automated force field Topology Builder (ATB) and repository: version 1.0.
; Journal of Chemical Theory and Computation, 2011, 7(12), 4026-4037.
; http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct200196n
;
; Disclaimer :
; While every effort has been made to ensure the accuracy and validity of parameters provided below
; the assignment of parameters is based on an automated procedure combining data provided by a
; given user as well as calculations performed using third party software. They are provided as a guide.
; The authors of the ATB cannot guarantee that the parameters are complete or that the parameters provided
; are appropriate for use in any specific application. Users are advised to treat these parameters with discretion
; and to perform additional validation tests for their specific application if required. Neither the authors
; of the ATB or The University of Queensland except any responsibility for how the parameters may be used.
;
; Release notes and warnings:
; (1) The topology is based on a set of atomic coordinates and other data provided by the user after
; after quantum mechanical optimization of the structure using different levels of theory depending on
; the nature of the molecule.
; (2) In some cases the automatic bond, bond angle and dihedral type assignment is ambiguous.
; In these cases alternative type codes are provided at the end of the line.
; (3) While bonded parameters are taken where possible from the nominated force field non-standard bond, angle and dihedral
; type code may be incorporated in cases where an exact match could not be found. These are marked as "non-standard"
; or "uncertain" in comments.
; (4) In some cases it is not possible to assign an appropriate parameter automatically. "%" is used as a place holder
; for those fields that could not be determined automatically. The parameters in these fields must be assigned manually
; before the file can be used.
;
;-----
; Input Structure : V8WL
; Output : ALL ATOM topology
; Use in conjunction with the corresponding all atom PDB file.
;
;-----
; Citing this topology file
; ATB molid: 224321
; ATB Topology Hash: 38f24
;
;-----
; Initial Guess Topology Generation:
; The topology was generated from AWL optimized geometry and HOPAC charges.
; Bonded and van der Waals parameters were taken from the GRMOS 54A7 parameter set.
;
;-----
;
; [ moleculetype ]
; Name nrexcl
; V8WL 3

```

Figura 5. Datos de Geometría de la molécula de Asfalteno. Fuente: (Malde, y otros, 2011)

# INFORMACIÓN DE LA MOLÉCULA DE HIDROCARBURO SATURADO.

## Paso 1:

Submit

Submit Molecule to Automated Topology Builder: version 2.2

(\*) Denotes required information

\*Molecule type  
heteromolec. -

\*Net charge (e)  
0  
Ex: 0, -1, 1, -15

\*Coordinates  
Coordinate data can be provided in one of 4 ways:

1. Draw/Modify Molecule with JSME and JSmol
2. Provide SMILES
3. Upload PDB file:  
Browse... octano.pdb
4. Paste PDB:

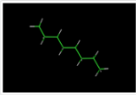
NOTE: all hydrogen atoms must be included!

Reset Next

**Figura 6.** Interfaz para subir el archivo de Avogadro (Octano) a ATB. Fuente: (Koziara, M, Malde, & Mark, 2011)

## Paso 2:

RMSE: 0.050 Å

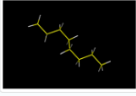


Formula C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>  
Atoms 26  
Netcharge 0  
Molid 23274

Show Molecule Page  
Add to Saved Molecules  
Preview in 3D

Fig 1. Click to toggle size.

RMSE: 0.650 Å

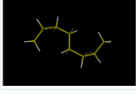


Formula C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>  
Atoms 26  
Netcharge 0  
Molid 36164

Show Molecule Page  
Add to Saved Molecules  
Preview in 3D

Fig 1. Click to toggle size.

RMSE: 1.405 Å



Formula C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>  
Atoms 26  
Netcharge 0  
Molid 36500

Show Molecule Page  
Add to Saved Molecules  
Preview in 3D

Fig 1. Click to toggle size.

**Figura 7.** Opciones de la molécula de Octano subida según su estructura en ATB. Fuente: (Koziara, M, Malde, & Mark, 2011)

### Paso 3:

Octane | C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> | MD Topology | NMR | X-Ray

Visualize with JSmol ATB Versions

Show Structure V2.2 (Current) V2.1 V1.2

Fragment-Based Parametrisation with OFraMP (ATB Partners Only) Shell Size 2

Molecule Information Molecular Dynamics (MD) Files X-Ray - Docking Files <sup>1</sup>H NMR Spectrum

Force Field Parameters

Force Field Gromos 54A Format GROMACS

Molecular Dynamics (MD) Files Flag Topology

Topology History

HEAD (Thu Jun 15 00:33:01 2017)

GROMACS Files

Topology Files Structure Files

GROMACS G54A7FF All-Atom (ITP file) All-Atom PDB (optimised geometry)  
GROMACS G54A7FF United-Atom (ITP file) All-Atom PDB (original geometry)  
United-Atom PDB (optimised geometry)  
United-Atom PDB (original geometry)

Figura 8. Opciones de descarga en ATB para GROMACS.

Fuente: (Koziara, M, Malde, & Mark, 2011)

```
HEADER UNCLASSIFIED 15-Jun-17
TITLE ALL ATOM STRUCTURE FOR MOLECULE UNK
AUTHOR GROMOS AUTOMATIC TOPOLOGY BUILDER REVISION 2017-05-09 11:22:47
AUTHOR 2 http://compbio.biosci.uq.edu.au/atb
1 H11 L49C 0 -4.572 0.369 0.886 1.00 0.00 H
HETATM 2 C1 L49C 0 -4.501 0.266 -0.000 1.00 0.00 C
HETATM 3 H9 L49C 0 -4.569 0.913 -0.884 1.00 0.00 H
HETATM 4 H10 L49C 0 -5.375 -0.396 -0.003 1.00 0.00 H
HETATM 5 C2 L49C 0 -3.193 -0.535 -0.000 1.00 0.00 C
HETATM 6 H12 L49C 0 -3.170 -1.195 0.879 1.00 0.00 H
HETATM 7 H13 L49C 0 -3.169 -1.195 -0.879 1.00 0.00 H
HETATM 8 C3 L49C 0 -1.940 0.351 0.001 1.00 0.00 C
HETATM 9 H14 L49C 0 -1.965 1.013 -0.879 1.00 0.00 H
HETATM 10 H15 L49C 0 -1.965 1.012 0.880 1.00 0.00 H
HETATM 11 C4 L49C 0 0.627 -0.443 0.000 1.00 0.00 C
HETATM 12 H16 L49C 0 -0.603 -1.104 0.880 1.00 0.00 H
HETATM 13 H17 L49C 0 -0.603 -1.104 -0.879 1.00 0.00 H
HETATM 14 C5 L49C 0 0.627 0.443 -0.000 1.00 0.00 C
HETATM 15 H18 L49C 0 0.603 1.104 -0.880 1.00 0.00 H
HETATM 16 H19 L49C 0 0.603 1.104 0.879 1.00 0.00 H
HETATM 17 C6 L49C 0 1.940 -0.351 -0.001 1.00 0.00 C
HETATM 18 H20 L49C 0 1.965 -1.013 0.879 1.00 0.00 H
HETATM 19 H21 L49C 0 1.965 -1.012 -0.880 1.00 0.00 H
HETATM 20 C7 L49C 0 3.193 0.535 0.000 1.00 0.00 C
HETATM 21 H22 L49C 0 3.170 1.195 -0.879 1.00 0.00 H
HETATM 22 H23 L49C 0 3.169 1.195 0.879 1.00 0.00 H
HETATM 23 C8 L49C 0 4.501 -0.266 0.000 1.00 0.00 C
HETATM 24 H24 L49C 0 4.569 -0.913 0.884 1.00 0.00 H
HETATM 25 H25 L49C 0 4.572 -0.909 -0.886 1.00 0.00 H
HETATM 26 H26 L49C 0 5.375 0.396 0.003 1.00 0.00 H
CONNECT 1 2
CONNECT 2 1 3 4 5
CONNECT 3 2
CONNECT 4 2 6 7 8
CONNECT 5 2
CONNECT 6 5
CONNECT 7 5
CONNECT 8 5 9 10 11
CONNECT 9 8
CONNECT 10 8
CONNECT 11 8 12 13 14
CONNECT 12 11
CONNECT 13 11
CONNECT 14 11 15 16 17
CONNECT 15 14
CONNECT 16 14
CONNECT 17 14 18 19 20
CONNECT 18 17
CONNECT 19 17
CONNECT 20 17 21 22 23
CONNECT 21 20
CONNECT 22 20
CONNECT 23 20 24 25 26
CONNECT 24 23
CONNECT 25 23
CONNECT 26 23
END
```

Figura 9. Datos de Geometría de la molécula de OCTANO dados

por ATB. Fuente: (Malde, y otros, 2011)

```

-----TITLE-----
:
: Octane
:
: This file was generated at 00:32 on 2017-06-15 by
:
: Automatic Topology Builder
:
: REVISION 2017-05-09 11:22:47
-----
: Authors : Alpekumar K. Malde, Le Zuo, Matthew Breeze, Martin Stroet, Alan E. Mark
:
: Institute : Molecular Dynamics group,
: School of Chemistry and Molecular Biosciences (SOMB),
: The University of Queensland, QLD 4072, Australia
:
: URL : http://compbio.biosci.uq.edu.au/atb
:
: Citation : Malde AK, Zuo L, Breeze M, Stroet M, Poger D, Nair PC, Gastenbrink C, Mark AE.
: An Automated force field Topology Builder (ATB) and repository: version 1.0.
: Journal of Chemical Theory and Computation, 2011, 7(12), 4626-4637.
: http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct200116w
:
: Disclaimer :
: While every effort has been made to ensure the accuracy and validity of parameters provided below
: the assignment of parameters is being based on an automated procedure combining data provided by a
: given user as well as calculations performed using third party software. They are provided as a guide.
: The authors of the ATB cannot guarantee that the parameters are complete or that the parameters provided
: are appropriate for use in any specific application. Users are advised to treat these parameters with discretion
: and to perform additional validation tests for their specific application if required. Neither the authors
: of the ATB or The University of Queensland except any responsibility for how the parameters may be used.
:
: Release notes and warnings:
: (1) The topology is based on a set of atomic coordinates and other data provided by the user after
: after quantum mechanical optimization of the structure using different levels of theory depending on
: the nature of the molecule.
: (2) In some cases the automatic bond, bond angle and dihedral type assignment is ambiguous.
: In these cases alternative type codes are provided at the end of the line.
: (3) While bonded parameters are taken where possible from the nominated force field non-standard bond, angle and dihedral
: type code may be incorporated in cases where an exact match could not be found. These are marked as "non-standard"
: or "uncertain" in comments.
: (4) In some cases it is not possible to assign an appropriate parameter automatically. "N" is used as a place holder
: for those fields that could not be determined automatically. The parameters in these fields must be assigned manually
: before the file can be used.
-----
: Input Structure : L49C
: Output : ALL ATOM topology
: Use in conjunction with the corresponding all atom PDB file.
:
: Citing this topology file
: ATB molid: 23274
: ATB Topology Hash: c9588
-----
: Final Topology Generation was performed using:
: A B3LYP/6-31G* optimized geometry.
: Bonded and van der Waals parameters were taken from the GRINDS 5447 parameter set.
: Initial charges were estimated using the ESP method of Merz-Kollman.
: Final charges and charge groups were generated by method described in the ATB paper.
: If required, additional bonded parameters were generated from a Hessian matrix calculated at the B3LYP/6-31G* level of theory.
-----

```

**Figura 10.** Datos de Topología de la molécula de OCTANO dados por ATB. Fuente: (Malde, y otros, 2011)

## INFORMACIÓN DE LA MOLÉCULA DE HIDROCARBURO AROMÁTICO.

### Paso 1:

Submit

Submit Molecule to Automated Topology Builder: version 2.2

(?) Denotes required information

\*Molecule type

\*Net charge (e)  
  
 Ex: 0, -1, 1, -15

\*Coordinates  
 Coordinate data can be provided in one of 4 ways:

1. Drag/Modify Molecule with JSMN and JSN
2. Provide SMILES
3. Upload PDB file
4. Paste PDB

NOTE: all hydrogen atoms must be included!

**Figura 11.** Interfaz para subir el archivo de Avogadro (Tolueno) a ATB. Fuente: (Koziara, M, Malde, & Mark, 2011)



## Paso 2:

Submit

Preview of the molecule you want to submit




Fig. 1. Image generated with PyMOL™ (PyMOL is a trademark of Schrödinger, LLC).  
Click to toggle size.

Formula	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	<a href="#">Preview in 3D</a>
Atoms	15	<a href="#">Review Submission</a>
Netcharge	0	
InChI	InChI=1S:C1=CC=C(C)C	
InChI Key	YXFVABEGYRONW-UHFFFAOYSA-N	

Your submission was within 0.1 Å RMSD of an existing structure in our database (molecule with same InChI Key and net charge).

RMSD: 0.001 Å




Fig. 1. Click to toggle size.

Formula	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	<a href="#">Show Molecule Page</a>
Atoms	15	<a href="#">Add to Saved Molecules</a>
Netcharge	0	<a href="#">Preview in 3D</a>
MolId	21	

**Figura 12.** Opciones de la molécula de Tolueno subida según su estructura en ATB. Fuente: (Koziara, M, Malde, & Mark, 2011)

## Paso 3:

Molecular Dynamics (MD) Files

Topology History

HEAD (Tue Jul 4 04:00:43 2011)

GROMACS Files

Topology Files	Structure Files
GROMACS 05A47FF All Atom (TF file)	All Atom PDB (optimized geometry)
GROMACS 05A47FF United Atom (TF file)	All Atom PDB (original geometry)
	United Atom PDB (optimized geometry)
	United Atom PDB (original geometry)

Warning! This molecule contains non standard atom types not included in the standard GROMACS 53A8 and 54A7 forcefield. To use these atom types the internal GROMACS parameter files must be updated. These can be downloaded using the link below. Instructions on where to place (and how to use) the files are provided in the README file included in the archive.


[GROMACS 5.0.4 \(53A8 - 54A7\)](#) [GROMACS 5.0.4 \(53A8 - 54A7\)](#)

Charge Group Distribution:

Graph representation of charge group distribution. [Click to toggle size.](#)

Fig. 2. Graph representation of charge group distribution.  
Click to toggle size.

Equivalent Atoms (Molecular Symmetry):



**Figura 13.** Opciones de descarga en ATB para GROMACS. Fuente: (Koziara, M, Malde, & Mark, 2011)

```

HEADER UNCLASSIFIED 04-Jul-17
TITLE ALL ATOM STRUCTURE FOR MOLECULE 0
AUTHOR GROMOS AUTOMATIC TOPOLOGY BUILDER REVISION 2017-07-03 14:53:07
AUTHOR 2 http://compbio.biosci.uq.edu.au/atb
HETATM 1 H3_I0L 0 -2.866 -0.887 -0.503 1.00 0.00 H
HETATM 2 C1_I0L 0 -2.466 -0.000 0.000 1.00 0.00 C
HETATM 3 H1_I0L 0 -2.866 0.001 1.024 1.00 0.00 H
HETATM 4 H2_I0L 0 -2.866 0.886 -0.504 1.00 0.00 H
HETATM 5 C2_I0L 0 -0.953 0.000 -0.002 1.00 0.00 C
HETATM 6 C7_I0L 0 -0.232 1.203 -0.000 1.00 0.00 C
HETATM 7 H8_I0L 0 -0.772 2.148 -0.007 1.00 0.00 H
HETATM 8 C3_I0L 0 -0.232 -1.203 -0.001 1.00 0.00 C
HETATM 9 H4_I0L 0 -0.772 -2.148 -0.008 1.00 0.00 H
HETATM 10 C4_I0L 0 1.165 -1.206 0.002 1.00 0.00 C
HETATM 11 H5_I0L 0 1.702 -2.152 0.000 1.00 0.00 H
HETATM 12 C5_I0L 0 1.870 -0.000 -0.001 1.00 0.00 C
HETATM 13 H6_I0L 0 2.958 -0.000 -0.001 1.00 0.00 H
HETATM 14 C6_I0L 0 1.165 1.206 0.002 1.00 0.00 C
HETATM 15 H7_I0L 0 1.702 2.152 0.000 1.00 0.00 H
CONECT 1 2
CONECT 2 1 3 4 5
CONECT 3 2
CONECT 4 2
CONECT 5 2 6 8
CONECT 6 5 7 14
CONECT 7 6
CONECT 8 5 9 10
CONECT 9 8
CONECT 10 8 11 12
CONECT 11 10
CONECT 12 10 13 14
CONECT 13 12
CONECT 14 6 12 15
CONECT 15 14
END

```

Figura 14. Datos de Geometría de la molécula de TOLUENO dados por ATB. Fuente: (Malde, y otros, 2011)

```

-----TITLE-----
: Toluene
:
: This file was generated at 04:03 on 2017-07-04 by
:
: Automatic Topology Builder
:
: REVISION 2017-07-03 14:53:07
:
: Authors : Alpeshkumar K. Malde, Le Zuo, Matthew Breeze, Martin Stroet, Alan E. Mark
:
: Institute : Molecular Dynamics group,
: School of Chemistry and Molecular Biosciences (SCMB),
: The University of Queensland, QLD 4072, Australia
:
: URL : http://compbio.biosci.uq.edu.au/atb
:
: Citation : Malde AK, Zuo L, Breeze M, Stroet M, Poger D, Nair PC, Oostenbrink C, Mark AE.
: An Automated force field Topology Builder (ATB) and repository; version 1.0.
: Journal of Chemical Theory and Computation, 2011, 7(12), 4026-4037.
: http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct200196n
:
: Disclaimer :
: While every effort has been made to ensure the accuracy and validity of parameters provided below
: the assignment of parameters is being based on an automated procedure combining data provided by a
: given user as well as calculations performed using third party software. They are provided as a guide.
: The authors of the ATB cannot guarantee that the parameters are complete or that the parameters provided
: are appropriate for use in any specific application. Users are advised to treat these parameters with discretion
: and to perform additional validation tests for their specific application if required. Neither the authors
: of the ATB or The University of Queensland except any responsibility for how the parameters may be used.
:
: Release notes and warnings:
: (1) The topology is based on a set of atomic coordinates and other data provided by the user after
: after quantum mechanical optimization of the structure using different levels of theory depending on
: the nature of the molecule.
: (2) In some cases the automatic bond, bond angle and dihedral type assignment is ambiguous.
: In these cases alternative type codes are provided at the end of the line.
: (3) While bonded parameters are taken where possible from the nominated force field non-standard bond, angle and dihedral
: type code may be incorporated in cases where an exact match could not be found. These are marked as "non-standard"
: or "uncertain" in comments.
: (4) In some cases it is not possible to assign an appropriate parameter automatically. "M" is used as a place holder
: for those fields that could not be determined automatically. The parameters in these fields must be assigned manually
: before the file can be used.
:
: Input Structure : I0L
: Output : ALL ATOM topology
: Use in conjunction with the corresponding all atom PDB file.
:
: Citing this Topology file
: ATB molid: 21
: ATB Topology Hash: 7e9c1
:
: Final Topology Generation was performed using:
: A B3LYP/6-31G* optimized geometry.
: Bonded and van der Waals parameters were taken from the GROMOS 54A7 parameter set.
: Initial charges were estimated using the ESP method of Merz-Kollman.
: Final charges and charge groups were generated by method described in the ATB paper.
: If required, additional bonded parameters were generated from a Hessian matrix calculated at the B3LYP/6-31G* level of theory.
:
: [ moleculetype ]
: Name nrexcl
: I0L 3
: [ atoms ]
: nr type resnr resid atom cgnr charge mass total_charge
: 1 HC 1 I0L H3 1 0.124 1.0080
: 2 C 1 I0L C1 1 -0.448 12.0110
: 3 HC 1 I0L H1 1 0.124 1.0080
: 4 HC 1 I0L H2 1 0.124 1.0080
: 5 C 1 I0L C2 1 0.290 12.0110
: 6 C 1 I0L C7 1 -0.260 12.0110

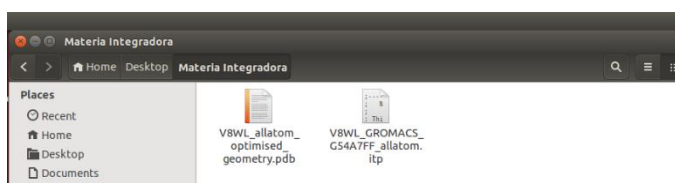
```

Figura 15. Datos de Topología de la molécula de TOLUENO dados por ATB. Fuente: (Malde, y otros, 2011)

## Anexo B

### SISTEMAS.

**Paso 1:** Los formatos de los archivos obtenidos de ATB (Topología y Geometría) se modificaron para que puedan ser procesados en GROMACS.



**Figura 16.** Archivos descargados de ATB con los formatos iniciales.

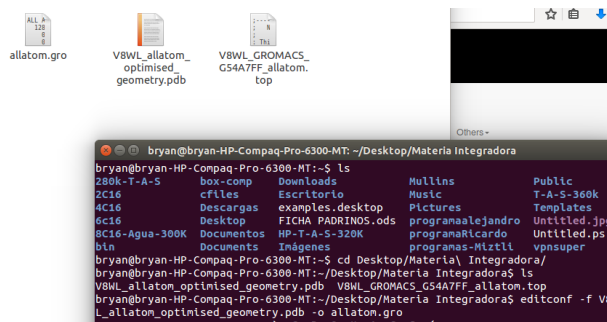
Fuente: Software ATB



**Figura 17.** Cambio de formato “.itp” a “.top”. Fuente: Software Avogadro

Para cambiar el formato de “.pdb” a “.gro” es necesario hacerlo por comandos en Linux, este proceso se realizó en dos pasos:

1. Nos ubicamos en la carpeta que se encuentra el archivo mediante el comando “cd”.
2. Se utilizó el comando “editconf” para crear una copia del archivo pero con formato “.gro”.



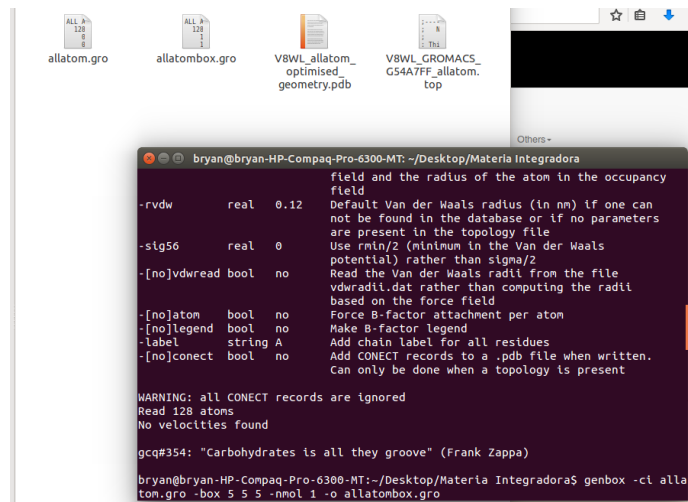
**Figura 18.** Cambio de Formato de “.pdb” a “.gro”. Fuente:  
Software GROMACS

**Paso 2:** Las celdas fueron creadas para cada sistema siguiendo esta secuencia:

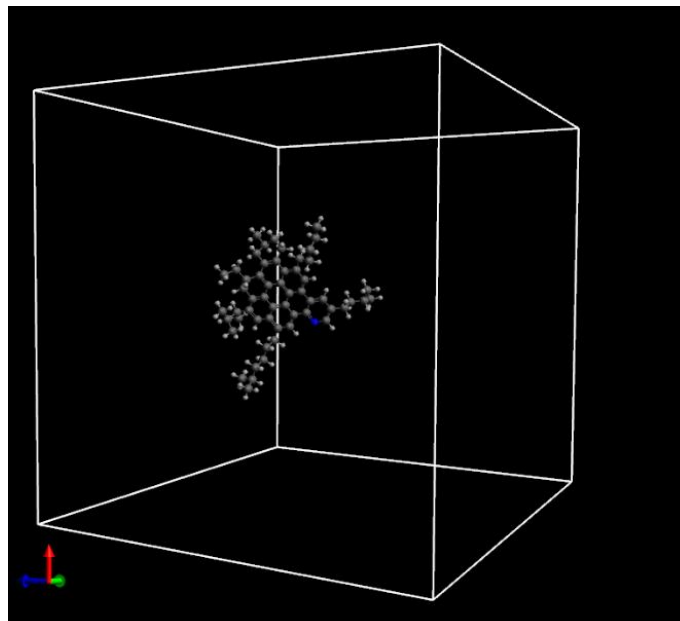
1. Primero se definió el tamaño de la celda que fue de 5 x 5 x 5 nanómetros.
2. Lo siguiente fue crear una celda conteniendo únicamente la molécula de asfalto en ella utilizando el comando “genbox”.
3. De la misma forma se creó una celda nueva, pero llena del fluido en el que se va a hacer interactuar a la molécula (octano, tolueno).
4. En el caso del agua, no es necesario crear una celda llena de este fluido, debido a que GROMACS posee el comando “spc216” para llenar de agua cualquier celda y de esta forma se pudo llenar la celda que contiene la molécula de asfalto.

## SISTEMA ASFALTENO-AGUA.

El sistema asfalteno-agua inició con el diseño de la celda que contiene la molécula de asfalteno usando el comando “genbox” y posteriormente llenándola de agua con el comando “spc216”.



**Figura 19.** Generación de la celda de 125 nm<sup>3</sup> en la cual está la molécula de asfalteno. Fuente: Software GROMACS



**Figura 20.** Celda generada vista en Avogadro. Fuente: Software Avogadro

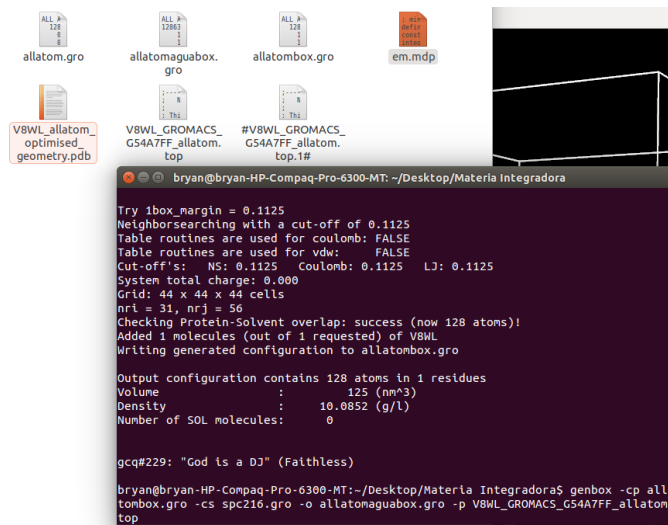
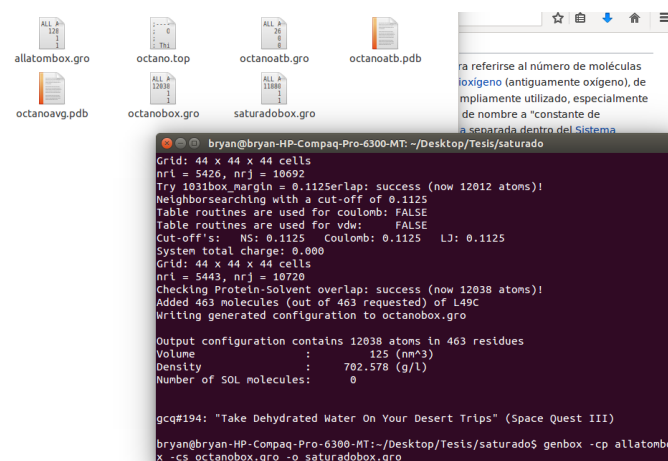


Figura 21. Llenado de agua de la celda. Fuente: Software GROMACS

### SISTEMA ASFALTENO-OCTANO.

Luego se combinaron las dos celdas; la que contenía al asfalto y la de las moléculas de octano para crear el segundo sistema.

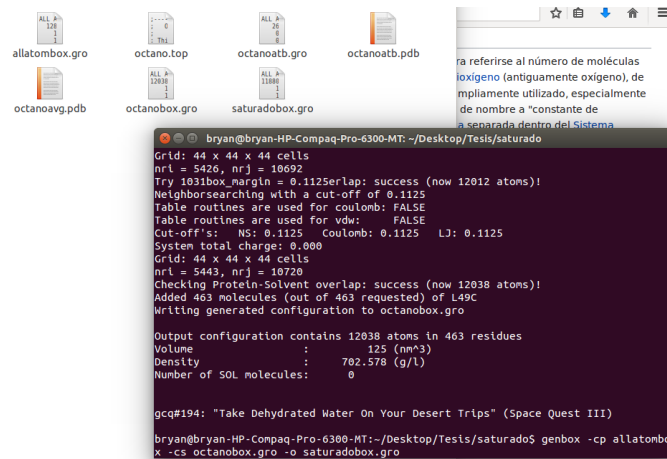


**Figura 22.** Generación de la celda llena de Octano. Fuente:

Software GROMACS

## SISTEMA ASFALTENO-TOLUENO.

Posteriormente se combinaron las dos celdas; la que contenía al asfalteno y la de las moléculas de tolueno para crear el tercer sistema.



**Figura 23.** Generación de la celda llena de Tolueno. Fuente:

Software GROMACS

# **BIBLIOGRAFÍA**



Akbarzadeh, K., Hammami, A., Zhang, D., Allenson, S., Creek, J., Kabir, S., . . . Solbakken, T. (2007). Los asfaltenos: Problemáticos pero ricos potencial. 25. Obtenidode:[https://www.slb.com/~media/Files/resources/oilfield\\_review/spanish07/aut07/p22\\_43.pdf](https://www.slb.com/~media/Files/resources/oilfield_review/spanish07/aut07/p22_43.pdf)

Castañeda, J. A., & Rivera, M. H. (2013). La Dinámica Molecular como herramienta para el analisis de la fisica de la fractura fragil. México.

Delgado, J. G. (2006). ASFALTENOS composición, agregación, precipitación. Universidad de los Andes, Facultad de Ingeniería Química, Mérida-Venezuela. Obtenido de <http://www.firp.ula.ve/archivos/cuadernos/S369A.pdf>

Figueroa, J. C. (2015). DESCRIPCIÓN ESTADÍSTICA DEL PROCESO DE PLEGAMIENTO DEL LAZO 36 DE LA CADENA AH2 DE LA HEMAGLUTININA. QUITO.

Juárez, H. (2015). Modelos y Problemas de Difusión. Universidad Autónoma Metropolitana, Departamento de Matemáticas, Iztapalapa. Obtenido de [http://sgpwe.izt.uam.mx/files/users/uami/hect/Taller\\_de\\_Modelado\\_I/notasTM1.pdf](http://sgpwe.izt.uam.mx/files/users/uami/hect/Taller_de_Modelado_I/notasTM1.pdf)

Koziara, K., M, S., Malde, A., & Mark, A. (2011). Automated Topology Builder (ATB) and Repository Version 2.2. Obtenido de <https://atb.uq.edu.au/>

Malde, A., Zuo, L., Breeze, M., Stroet, M., Poger, D., Nair, P., . . . Mark, A. (2011). An Automated force field Topology Builder (ATB) and repository. Journal of Chemical Theory and Computation. Obtenido de <https://atb.uq.edu.au/>

Masciarelli, R., Stancich, S., & Fernando, S. (2012). Transferencia de Materia. Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rosario, Santa Fe. Obtenido de

[https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/quimica/4\\_anio/ingenieria\\_reaciones/Transferencia\\_de\\_Materia.pdf](https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/quimica/4_anio/ingenieria_reaciones/Transferencia_de_Materia.pdf)

Pérez, L. M., Manzano, G. S., & Pacheco, F. R. (2016). Propiedades de los hidrocarburos saturados y superiores. México.

Stellman, J. M. (1998). ENCICLOPEDIA DE SALUD Y SEGURIDAD EN EL TRABAJO. España: Chantal Dufresne.

Malde AK, Zuo L, Breeze M, Stroet M, Poger D, Nair PC, Oostenbrink C, Mark AE. An Automated force field Topology Builder (ATB) and repository: version 1.0. Journal of Chemical Theory and Computation, 2011, 7(12), 4026-4037. <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct200196m>