



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ



FACULTAD DE CIENCIAS

LICENCIATURA EN FÍSICA

**MANUAL DE USUARIO PARA:
SIMULADOR DE DINÁMICA MOLECULAR DE ESFERAS DURAS**

**MATERIAL DIDÁCTICO PARA LA MATERIA DE:
SIMULACIÓN DE DINÁMICA MOLECULAR I:**

AUTOR: DR. CÉSAR GABRIEL GALVÁN PEÑA

ABRIL/2021



INDICE

Descripción técnica	2
Objetivo general	2
Base Teórica	2
Algoritmo de Simulación	4
Inicialización:	4
Equilibración:	5
Producción:	5
Descripción de uso didáctico	6
Temas que se cubren con el software evaluado	6
Instrucciones y especificaciones de uso.	6
Ejemplos de uso didáctico del software	10
APENDICE A	12
Instalación de la VirtualBox	12
APENDICE B	16
Instalación del sistema operativo UBUNTU 20.04 en la VirtualBox	16
APENDICE C	30
Uso de LINUX	30
APENDICE D	31
Instalación de Gnuplot y Gfortran	31
APENDICE E	33
Arranque del programa.	33
Referencias	34



Descripción técnica

El presente software realiza una simulación de dinámica molecular para un potencial de esferas duras donde el usuario puede introducir los valores de distintos parámetros como el número de partículas, el número de pasos de simulación y la densidad, por mencionar algunos. El programa está escrito en el lenguaje Fortran y se basó en los códigos de Haile [1]. Además, con este simulador se obtienen gráficas específicas de parámetros importantes en la dinámica molecular. El usuario solo tiene que correr el programa y automáticamente obtendrá dichas gráficas gracias al uso de Gnuplot [2] y un código bash. Todos los requisitos para la instalación del programa se encuentran explicados en este manual, desde la instalación de un ambiente unix, hasta los comandos específicos para manipular el programa.

Objetivo general

En este programa se tiene como objetivo principal aterrizar gran parte de los contenidos del curso de Simulación de Dinámica Molecular I mediante un análisis práctico centrado en la cinemática de colisiones de esferas duras. El alumno interactúa de forma directa con un sistema de partículas simulado, que está fundamentado completamente en los conocimientos adquiridos en el curso, por medio de la modificación de parámetros que le serán familiares.

Base Teórica

Los algoritmos de dinámica molecular se dividen en dos clases; aquellos para cuerpos suaves, cuyas fuerzas intermoleculares son funciones continuas de la distancia entre las moléculas, y aquellas para cuerpos duros, para los que las fuerzas son discontinuas.

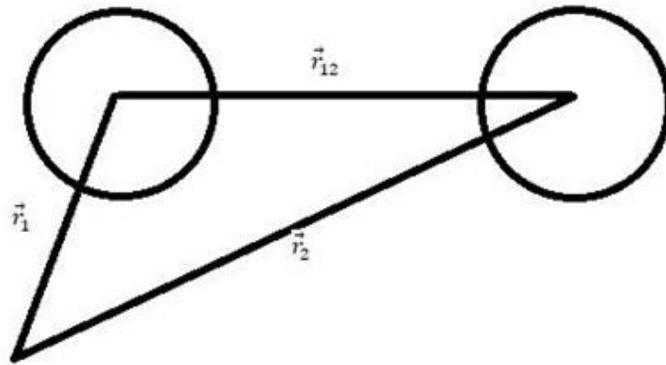
En particular las esferas duras de diámetro σ interactúan a través de un potencial

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r \leq \sigma \\ 0 & \text{si } r > \sigma \end{cases}$$

En cualquier espacio, cuando hacemos colisionar 2 esferas duras, la fuerza repulsiva es ejercida a lo largo de la línea que une los centros de las esferas

$$\vec{r}_{12} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1,$$

como se puede ver en la figura.



Si resolvemos este sistema mediante la conservación del momento, vamos a obtener que las velocidades de cada esfera después de la colisión están dadas por [1]

$$\vec{u}_1 = \vec{v}_1 - [(\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \cdot \hat{r}_{12}] \hat{r}_{12},$$

y

$$\vec{u}_2 = \vec{v}_2 - [(\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \cdot \hat{r}_{12}] \hat{r}_{12},$$

donde \vec{v}_i es la velocidad de la partícula i antes de la colisión. Antes de poder aplicar las ecuaciones anteriores, debemos saber primero si las 2 esferas se encuentran en un curso de colisión, y en caso de que ocurra, saber cuándo lo hacen; para ello si consideramos que las esferas tienen un radio σ , el tiempo de colisión estará dado por



$$t_c = t_0 + \frac{-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) \pm \sqrt{(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - v_{12}^2 (r_{12}^2 - \sigma^2)}}{v_{12}^2}$$

donde t_0 es el tiempo inicial. A partir de esta ecuación vamos a distinguir 3 situaciones importantes

a) $-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) < 0$

El producto es proporcional a la diferencia de velocidad a lo largo de la línea que une a los centros. Si la componente es negativa, entonces las esferas se acercan una a la otra y una colisión puede ocurrir. Si es positiva, las esferas se alejan una de la otra y definitivamente no ocurrirá una colisión. Ésta es una condición necesaria pero no suficiente, ya que, aunque las esferas se estén acercando, esto no garantiza que vayan a colisionar

b) $-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - v_{12}^2 (r_{12}^2 - \sigma^2) \geq 0$

Ésta es una condición suficiente para una colisión, ya que se obtiene un ángulo máximo en el cual las 2 esferas apenas se tocan.

c) Cuando se satisface la condición anterior, la ecuación del tiempo de colisión tiene 2 soluciones, pero como sólo una es físicamente posible, se tomará la que corresponda al menor valor de los 2 resultados.

Algoritmo de Simulación

La simulación se divide en 3 partes: inicialización, equilibración y producción. Para poder realizar estos pasos debemos considerar un sistema de unidades donde cantidades dimensionales se hacen unitarias, lo cual permite mayor eficiencia en el cálculo.

Inicialización

Establece el estado termodinámico

1. Se escoge un número de esferas N y un factor de empaquetamiento



2. Calculamos el volumen del cubo principal y se toma la longitud en el borde del cubo como distancia unitaria. En estas unidades se calcula el diámetro de la esfera
3. Se calculan posiciones iniciales, típicamente en una estructura fcc.
4. Se asignan velocidades iniciales, donde se aconseja fuertemente procurar que la suma de todas las velocidades asignadas sea cero.
5. Construir la tabla de posiciones y velocidades.

Equilibración

Como los tiempos promedio para las propiedades de equilibrio deben ser independientes de las velocidades, se desarrolla la dinámica del sistema para que “olvide” su preparación inicial.

6. Ejecutar los pasos 7-11 para cierto número de colisiones dado.

Producción

Se genera el equilibrio de las trayectorias espacio-fase para poder calcular propiedades el sistema

7. De la tabla de colisiones, identificar el tiempo hasta la siguiente colisión y las esferas a colisionar.
8. Mover a todas las esferas de posición al tiempo de la siguiente colisión.
9. Aplicar periódicamente condiciones de frontera a cualquier esfera que salga de la celda unitaria.
10. Obtener las velocidades post-colisión.
11. Calcular nuevamente la tabla de los tiempos de colisión.
12. Calcular contribuciones a las propiedades de equilibrio.
13. Iterar los pasos 7-12 para el número deseado de colisiones.



Descripción de uso didáctico

Este simulador ayuda a entender de forma práctica y simple los conceptos de la dinámica molecular a través del potencial de esferas duras. Dicho potencial es el tema de estudio de la cuarta unidad del contenido programático de la materia de Simulación de la dinámica molecular I. Dado que la materia consta de 6 unidades, el simulador abarca el 67% del contenido programático. En esta sección mostramos los temas abarcados por el simulador así como los pasos a seguir para poder realizar una simulación. Además, se muestran algunos ejemplos de las prácticas que se pueden realizar .

Temas que se cubren con el software evaluado

- Introducción al sistema Unix y al sistema Linux.
- Estructura y elementos básicos.
- Fortran: elementos básicos.
- Descripción del Lenguaje.
- Archivos y bibliotecas Fortran.
- Definiciones de sistema, estado, observables, interacciones, etc.
- Modelado versus simulación
- Teoría versus experimento
- Reduccionismo versus simulación
- Modelos para simulación molecular
- Lo correcto versus lo erróneo.
- Cinemática de Colisiones de Esferas-Duras.
- Tiempos de Colisión.
- Algoritmos de Simulación.
- Posiciones y Velocidades Iniciales.
- Monitoreo del Equilibrio.
- Impredictibilidad
- Diagrama de Fase
- Evaluación de la Confiabilidad de Resultados.

Instrucciones y especificaciones de uso.

Para poder utilizar el programa es necesario tener un sistema operativo basado en



LINUX, así como tener instalado el programa gnuplot, el compilador gfortran y ser capaz de ejecutar archivos tipo bash. También es posible ejecutarlo en MacOS, bajo los mismos requisitos. En los apéndices A, B, C y D se anexa información en caso de que el usuario no esté familiarizado con el uso de LINUX, gnuplot y/o gfortran, así como una opción en caso de que el sistema operativo que se utilice sea uno distinto y no se desee removerlo.

Para ejecutar el programa se deben seguir los siguientes pasos (asumiendo alguna experiencia previa utilizando la terminal de LINUX):

- 1) Se tiene que abrir una terminal en la ubicación donde se encuentra el archivo "simulador.sh". (APENDICE E)
- 2) Ejecutarlo escribiendo en la terminal bash simulador.sh. En el caso de MacOS se recomienda ejecutar el archivo simuladorMAC.sh. Cuando el programa se ejecute se le pedirá al usuario ingresar el número de esferas, escriba el valor (se muestra un número recomendado) y presione enter.
- 3) Luego se pedirá el factor de empaquetamiento (su valor debe estar entre 0.3 y 0.74 y debe introducirse seguido de los caracteres D0. Por ejemplo, si el factor de empaquetamiento a introducir es 0.49, el usuario deberá teclear 0.4D0 para la correcta ejecución del programa)
- 4) El programa pedirá a continuación el número de colisiones a calcular durante la producción.
- 5) Lo siguiente a introducir será el incremento de muestreo (sampling increment), que es el intervalo de colisión al cual acumulamos valores para la presión, distribución de velocidad y función de distribución radial ($g(r)$).
- 6) A continuación, se pedirá ingresar intervalos para imprimir las propiedades que se monitorean durante la ejecución.
- 7) El siguiente parámetro por introducir es el número de colisiones a realizar durante la equilibración del sistema.
- 8) Finalmente, debe introducirse el intervalo al cual imprimir el valor de $g(r)$.
- 9) Una vez hecho esto el programa realizará todos los cálculos para imprimir los valores de: el número de colisiones, el tiempo al que suceden las



colisiones, el parámetro de orden, el par de esferas que colisionaron, la energía cinética del sistema y el valor del virial.

Se sugiere introducir valores no muy lejanos a los sugeridos, pues el tiempo de ejecución del programa se extendería y las gráficas podrían dar resultados no deseados.

En la Fig. 1 se muestra un ejemplo de cómo se verá el programa al introducir los parámetros de simulación

```

ENTER THE NUMBER OF SPHERES
(SUGESTED NUMBER: 100)
100
ENTER THE PACKING FRACTION (IT MUST BE <0.74)
0.400
ENTER THE TOTAL NUMBER OF COLLISIONS
TO COMPUTE DURING PRODUCTION
(SUGESTED NUMBER: 1000)
1000
ENTER THE SAMPLING INCREMENT
(SUGESTED NUMBER:10)
10
ENTER COLLISION INTERVAL AT WHICH TO PRINT PROPERTIES
THAT MONITOR THE RUN.(IT MUST BE AN INTENGER MULTIPLE
OF THE SAMPLING INCREMENT)
100
ENTER THE TOTAL NUMBER OF COLLISIONS
TO COMPUTE DURING EQUILIBRATION
(SUGESTED NUMBER:10000)
10000
ENTER COLLISION INTERVAL AT WHICH TO PRINT RADIAL
DISTRIBUTION FUNCTION, G(R)
(SUGESTED NUMBER: 1000)
1000

```

Fig. 1 Introducción de parámetros necesarios para la simulación de esferas duras.

Una vez ingresados los parámetros, el programa empezará a realizar la simulación y aparecerá la información que se muestra en la Fig. 2.

```

MOLECULAR DYNAMICS FOR 100 HARD SPHERES
RHO*SIGMA**3 = 0.0000
PACKING FRACTION = 0.4000 C-S VIRIAL = 5.926
-----
COLL NO.   TIME      H-FUNC   ORDER   COLLIDING K ENERGY   VIRIAL
          0      PARM     PAIR
          0      1.0000
100  0.5032D-01  -0.1805  0.8025  18  19  65.75038  7.63454
200  0.8223D-01  -0.1816  0.7236  15  16  65.75038  5.93417
300  0.1125D+00  -0.1800  0.5331  51  76  65.75038  6.29192
400  0.1384D+00  -0.1815  0.3448  19  53  65.75038  6.05467
500  0.1708D+00  -0.1809  0.1279  74  76  65.75038  5.96498

```

Fig. 2 Inicio de los cálculos.



En la primera columna se muestra el número de colisiones que han ocurrido, en la columna TIME se muestra el tiempo que transcurre desde la última colisión a la siguiente, y además en la columna COLLIDING PAIR aparece el par de partículas que colisionaron. H-FUNC corresponde a la función H dada por

$$H_x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(v_x) \ln f(v_x) dv_x,$$

donde $f(v_x)$ es la distribución de velocidades de la componente x de la posición de las partículas. El parámetro de orden en la cuarta columna está dado por

$$\lambda = \frac{1}{3} [\lambda_x + \lambda_y + \lambda_z],$$

con

$$\lambda_x = \frac{1}{N} \sum_i^N \cos\left(\frac{4\pi x_i}{a}\right).$$

Cuando este parámetro tiende a cero podemos decir que el sistema se encuentra en equilibrio. Finalmente, K ENERGY y VIRIAL son la energía cinética y el término del virial dado por el promedio temporal de

$$1 + \frac{1}{3Nk_B T} \left\langle \sum_i \sum_j \mathbf{F}_{i,j} \cdot \mathbf{r}_{i,j} \right\rangle,$$

donde $\mathbf{F}_{i,j}$ es la fuerza entre la partícula i y la partícula j .

Existe la posibilidad de que no funcione el programa gnuplot correctamente con los parámetros utilizados. Esto dependerá de cómo se realizó la instalación del programa, por lo que al momento de la instalación de gnuplot se recomienda revisar que se instale la terminal de salida "qt" para el caso de Mac o "x11" para el caso de LINUX. Se puede verificar esto ingresando a gnuplot y escribiendo set terminal. Una vez terminada la ejecución del software inmediatamente aparecerán ventanas con distintos gráficos.

Ejemplos de uso didáctico del software

A continuación, se darán algunos ejemplos de uso del software, dando valores específicos a los parámetros en el programa y una idea de cómo interpretar las gráficas que el programa elabora.

Una manera de observar la fase en que se encuentra el sistema es la función $g(r)$ como los que se muestra en la Fig. 3.

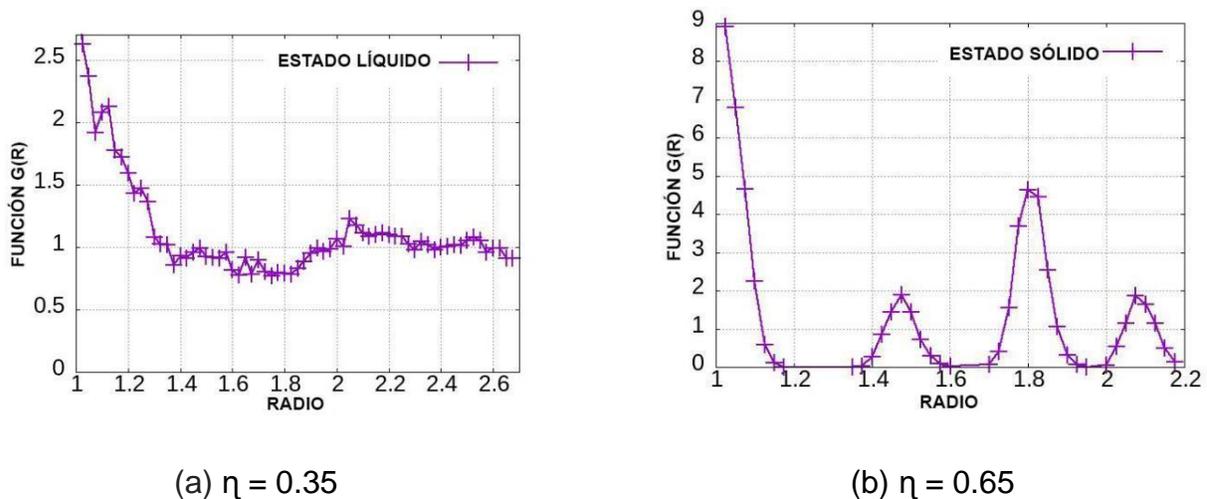


Fig.3 Función de distribución radial para un sistema de esferas duras. (a) Fase líquida. (b) Fase sólida.

Vemos que cuando el factor de empaquetamiento $\eta = 0.35$, se observa una $g(r)$ característica de un líquido [reffffff] y cuando este crece a $\eta = 0.65$ tenemos un sólido donde notamos picos que caracterizan la estructura de ordenada de las esferas del sistema.

Para monitorear la disolución de una red FCC compuesta por N átomos se calcula el parámetro de orden en la Fig.4 conforme va en aumento el número de colisiones en una simulación con un número de átomos $N = 108$ y un factor de empaquetamiento $\eta = 0.3$. Inicialmente, el parámetro de orden tiene un valor de 1, esto es de esperarse en todas las simulaciones ya que todos los átomos ocupan sitios muy bien especificados en la red FCC y las componentes X_i, Y_i y Z_i de las

posiciones están todas integradas por múltiplos de $\frac{1}{2}a$ con “a” siendo la longitud de uno de los lados de la celda unitaria.

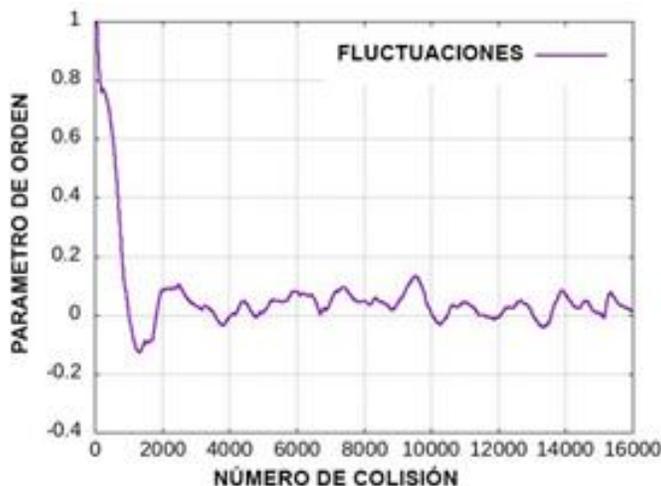


Fig. 4. Desintegración de la red inicial FCC monitoreado por el parámetro de orden λ en una simulación de 108 esferas duras y factor de empaquetamiento $\eta=0.3$.

A medida que aumenta el número de colisiones la red se disuelve rápidamente y el parámetro de orden va decayendo de valor. Cuando la red es disuelta completamente (alrededor de la colisión 1500) λ fluctúa alrededor de 0, esto nos dice que los átomos están ahora distribuidos aleatoriamente en torno a sus posiciones originales en la red.



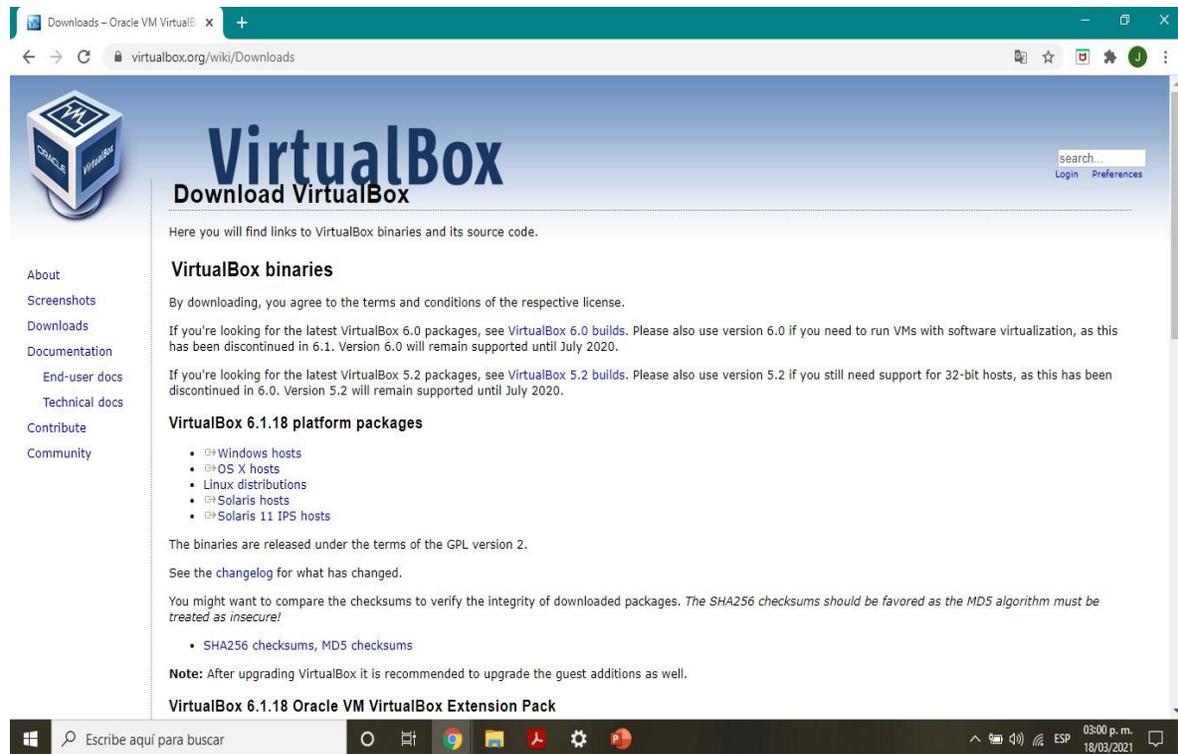
APENDICE A

Instalación de la VirtualBox

Para usar el material didáctico es necesario el acceso a una computadora con el sistema operativo Linux. A continuación, se presenta una opción a la cual se puede recurrir en caso de no cumplir con este requisito, la cual consiste en la creación de una máquina virtual por medio del programa VirtualBox.

Ingresa a la página <https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads>

Una vez dentro verá en pantalla las diferentes versiones de VirtualBox disponibles, y las plataformas en las que se puede instalar.



En este caso ejemplificador, realizaremos la instalación en una computadora con sistema operativo Windows 10, por lo que seleccionaremos la opción *Windows hosts*.

VirtualBox 6.1.18 platform packages

- [Windows hosts](#)
- [OS X hosts](#)
- [Linux distributions](#)
- [Solaris hosts](#)
- [Solaris 11 IPS hosts](#)

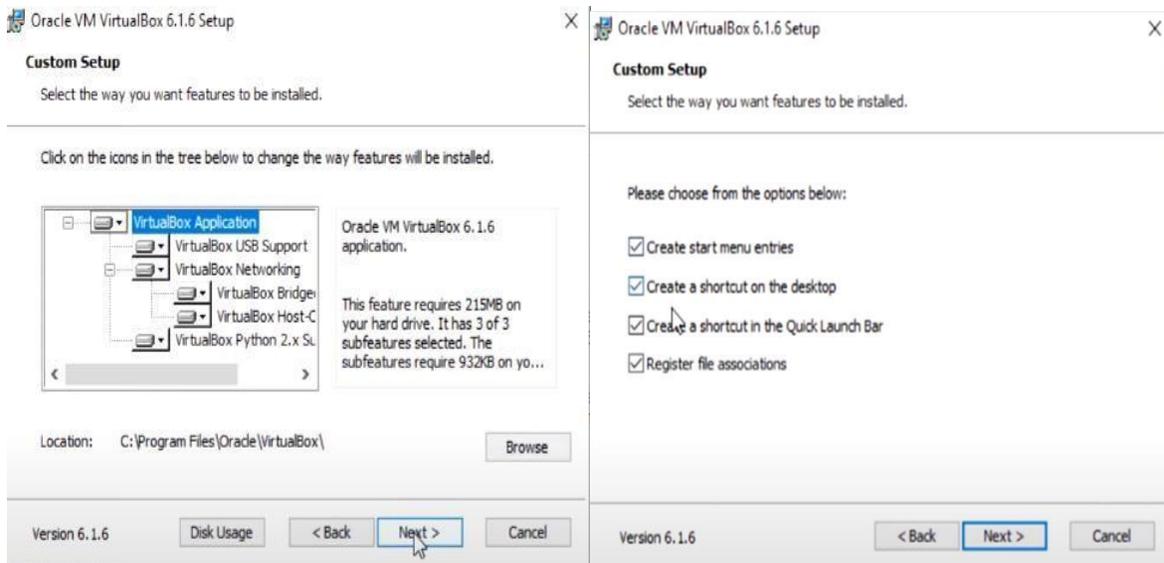
Seremos dirigidos a la siguiente pantalla y haremos clic en el recuadro azul del centro con la leyenda *Download VirtualBox 6.1* y comenzará la descarga del archivo *VirtualBox-6.1.18-142142-Win*.

The screenshot shows the Oracle VM VirtualBox website. The main heading is "VirtualBox Welcome to VirtualBox.org!". Below the heading, there is a "Download VirtualBox 6.1" button highlighted with a red box and a red arrow pointing to it. The website also features a "News Flash" section on the right with several news items, including "VirtualBox 6.1.18 released!" and "VirtualBox 6.1.16 released!". The footer of the page shows the URL "https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads" and the Windows taskbar with the search bar and system tray.

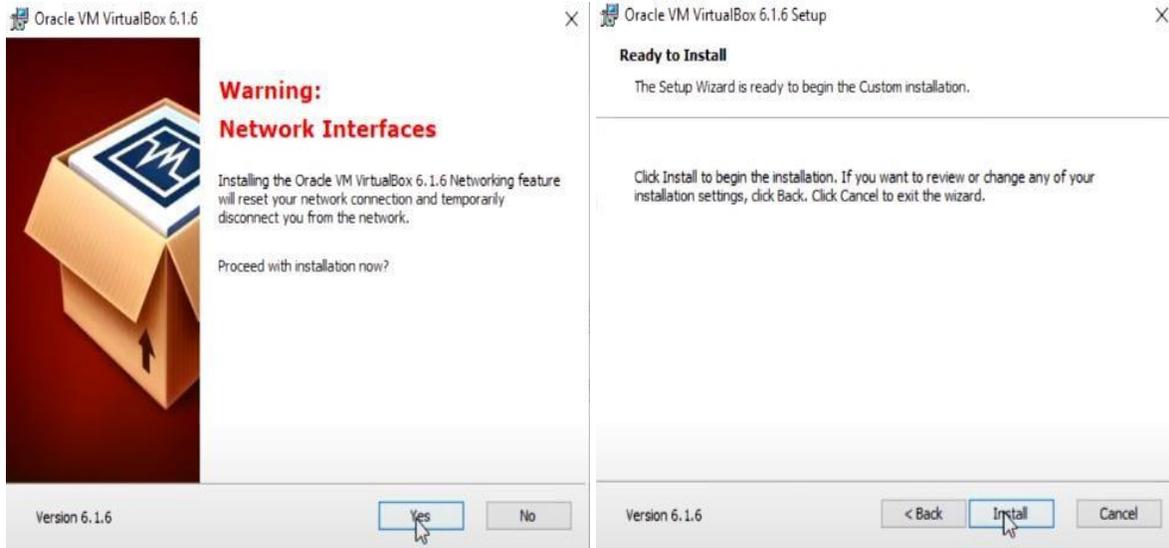
Una vez que se ha terminado la descarga, procedemos a ejecutar el archivo descargado y se desplegará la siguiente ventana



Daremos clic en *Siguiente*, y una vez que verifiquemos que no falte de seleccionar ninguna de las opciones mostradas en las siguientes ventanas, también lo haremos en estas.



Aparecerá una ventana de advertencia, haremos clic en Sí y se mostrará una ventana que nos pedirá confirmar antes de comenzar con la instalación, confirmaremos la instalación dando clic en Instalar



Durante la instalación se mostrará una ventana que nos preguntará sobre la instalación de elementos necesarios para el funcionamiento correcto de VirtualBox, marcaremos el recuadro que dice *Confiar siempre en software proveniente de "Oracle Corporation"* y daremos clic en *Instalar*.

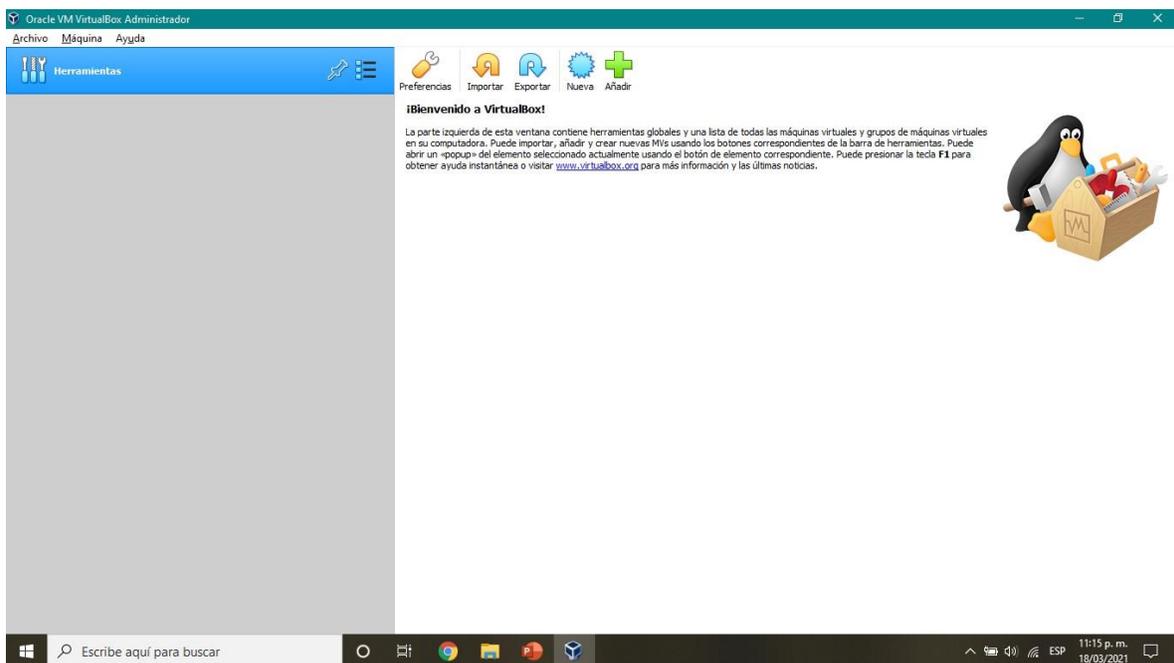


Al finalizar la instalación se mostrará una ventana que nos indicará que la instalación de *Oracle VM VirtualBox 6.1.6* se ha completado, en esta ventana marcaremos la casilla que dice *Iniciar Oracle VM VirtualBox 6.1.6 al finalizar la instalación* y haremos clic en *Finalizar*.

APENDICE B

Instalación del sistema operativo UBUNTU 20.04 en la VirtualBox

Una vez que hemos finalizado la instalación de VirtualBox, se abrirá la siguiente ventana (en caso de no seleccionar que al finalizar la instalación se ejecutara el programa, basta con hacer doble clic sobre el acceso directo que se ha creado en el escritorio para acceder a esta)



Nos dirigiremos a la parte superior izquierda de la ventana y haremos clic en la pestaña *Máquina* y seleccionaremos la opción *Nueva...*



Aparecerá una ventanilla en la que ingresaremos el nombre de la máquina virtual y el sistema operativo. En nuestro caso en *Nombre* ingresaremos *Ubuntu 20*, y automáticamente en *Tipo* aparecerá *Linux* y en *Versión* aparecerá *Ubuntu (64 bit)*. Una vez que verifiquemos que los campos están seleccionados de esta manera



daremos clic en *Siguiente*.

Crear máquina virtual

Nombre y sistema operativo

Seleccione un nombre descriptivo y una carpeta destino para la nueva máquina virtual y seleccione el tipo de sistema operativo que tiene intención de instalar en ella. El nombre que seleccione será usado por VirtualBox para identificar esta máquina.

Nombre:

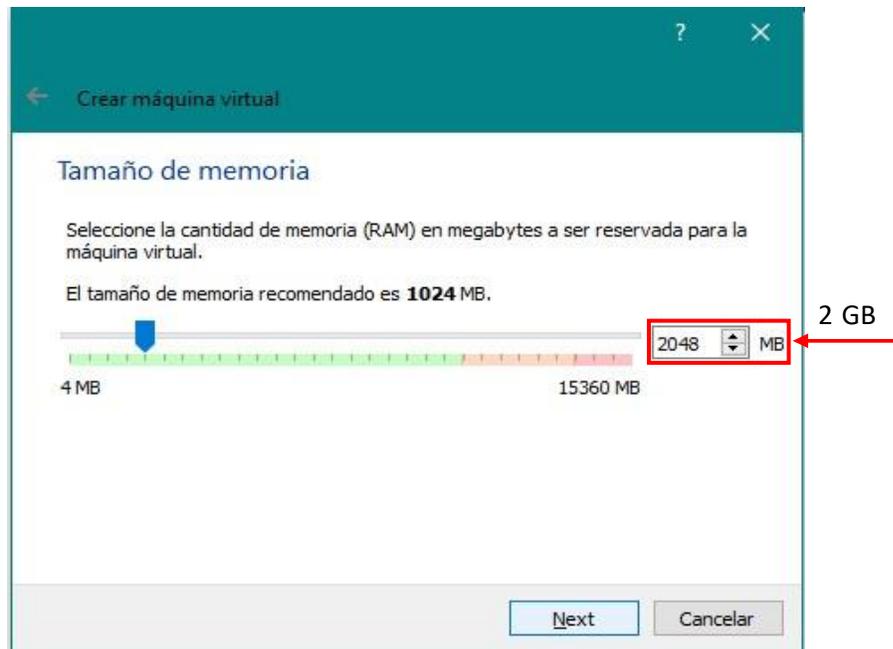
Carpeta de máquina:

Tipo: 

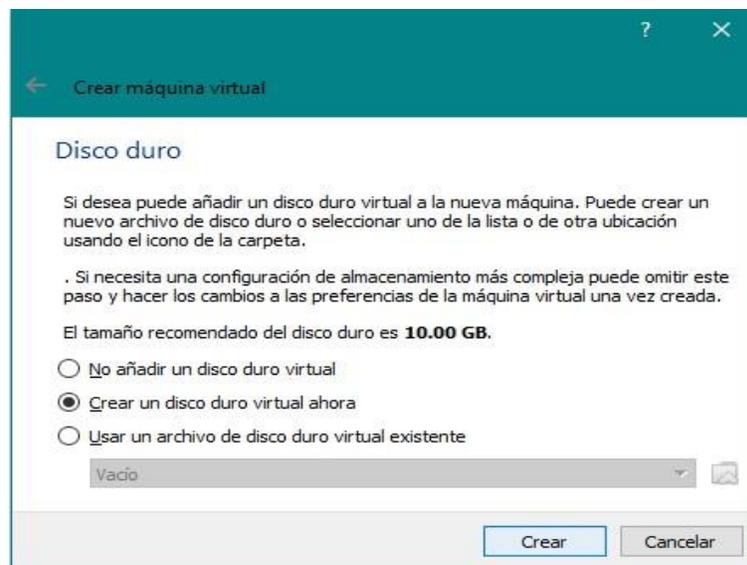
Versión:

Modo experto

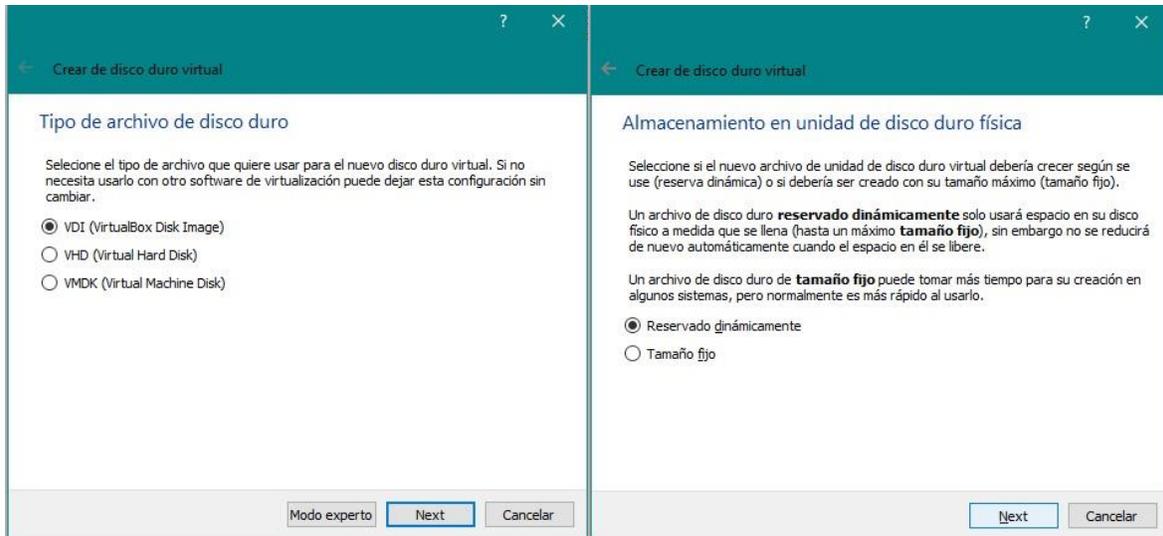
Hecho esto, la siguiente ventana nos pedirá asignar una cantidad determinada de memoria RAM a la máquina virtual, que para nuestros fines 2.00 GB es la cantidad de memoria adecuada. Si se desea se puede asignar más memoria a la máquina virtual, pero recuerde que la memoria que asigne dejará de estar disponible en su ordenador mientras use la máquina virtual, por lo que tome en cuenta la memoria RAM que necesita para que su ordenador funcione de manera adecuada.



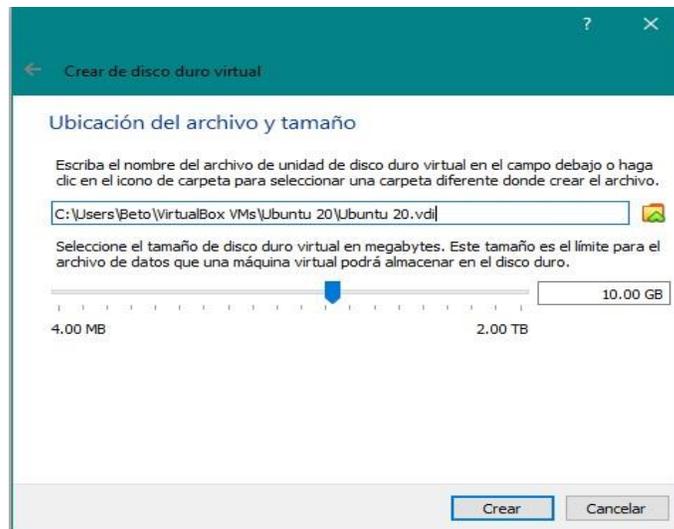
Una vez asignemos la memoria para la máquina virtual daremos clic en *Siguiente* y se desplegará una ventana sobre el disco duro virtual. Seleccionaremos *Crear un disco duro virtual ahora* y haremos clic en *Crear*.



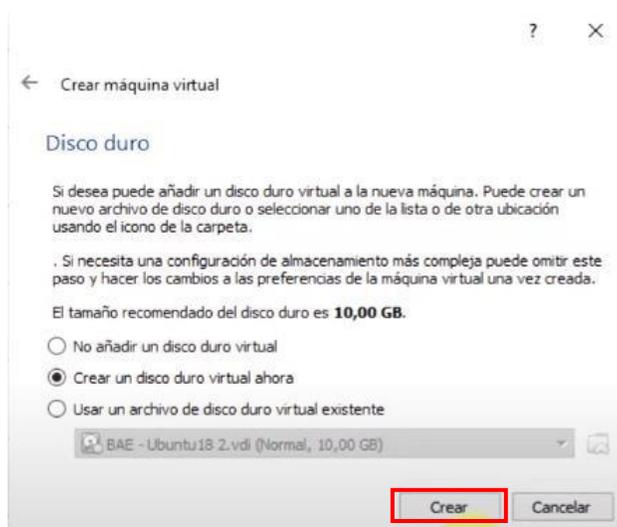
En la siguiente ventana seleccionaremos el tipo de archivo de disco duro, el cual en nuestro caso será *VDI (VirtualBox Disk Image)*, daremos clic en *Siguiente* y en la ventana posterior a esta seleccionaremos *Reservado dinámicamente* y haremos clic en *Siguiente*.



Hecho esto tocará determinar el tamaño del disco duro virtual. De manera predeterminada el tamaño es 10.00 GB, que para nuestro fin es adecuado.

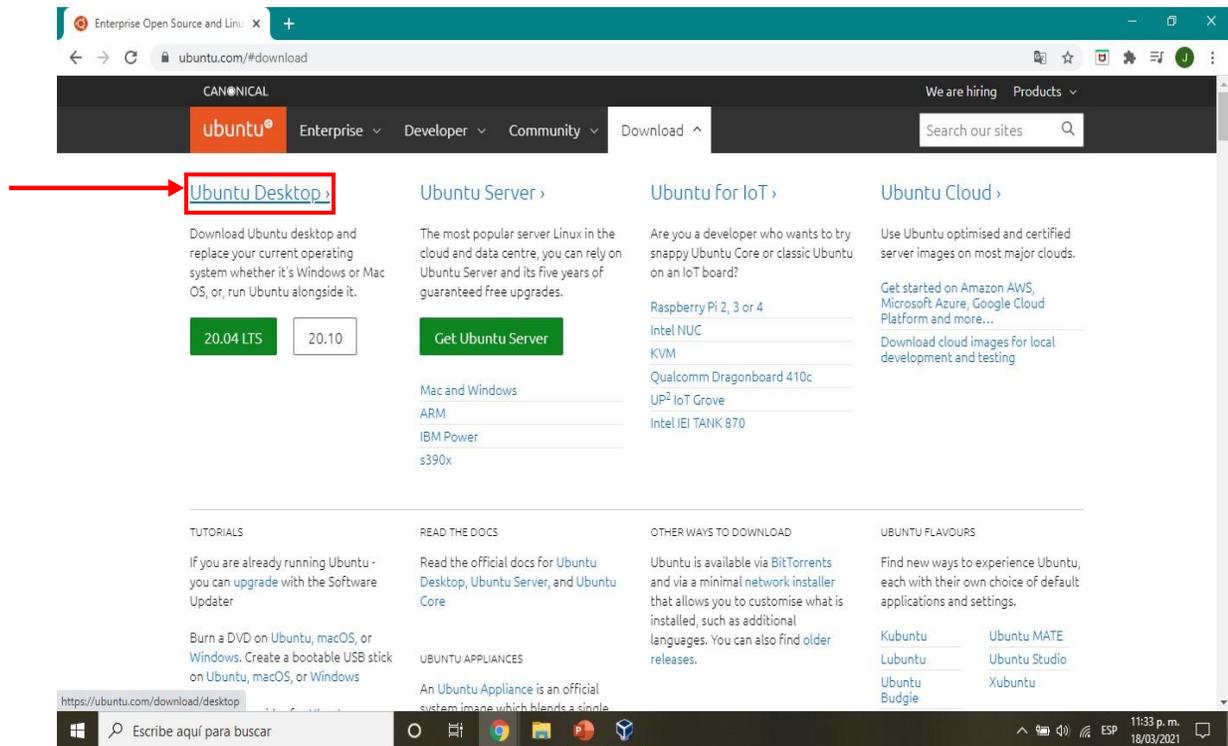
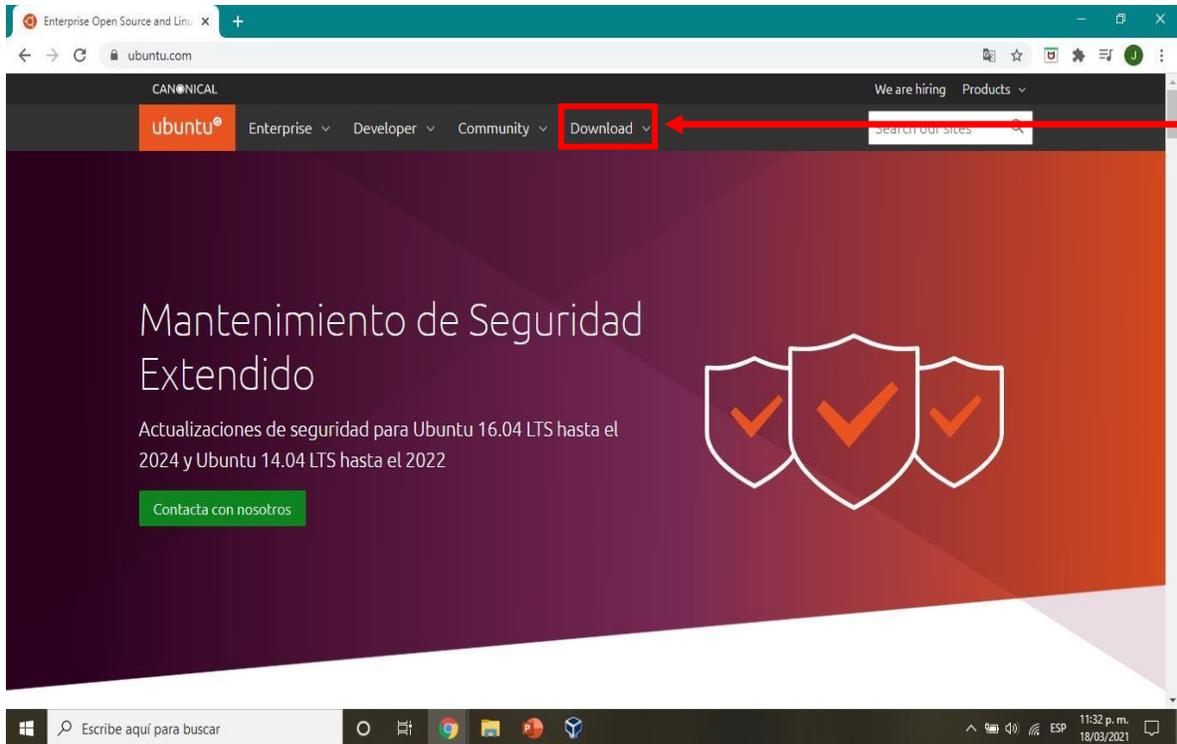


Determinado el tamaño del disco duro virtual, daremos clic en *Crear* y se mostrará la primera ventana acerca del disco duro virtual y donde nuevamente haremos clic en *Crear*.

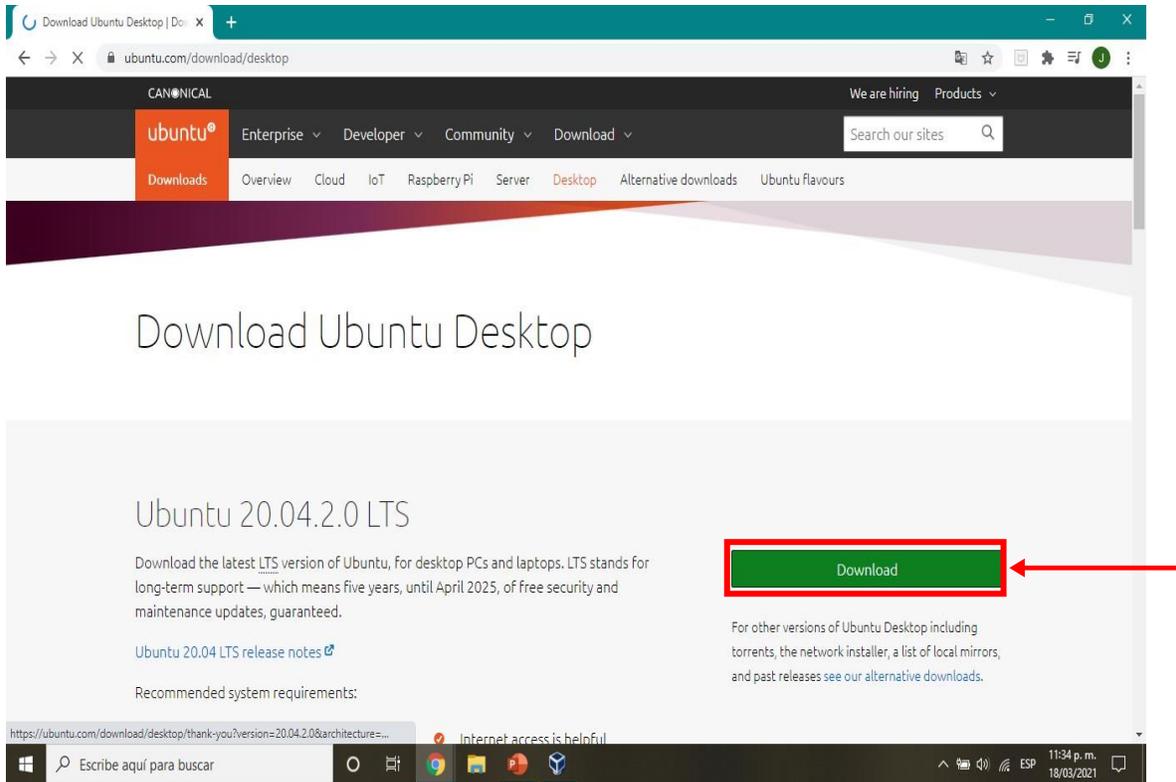


Hecho esto, habremos creado la máquina virtual. Ahora, regresamos a la ventana de VirtualBox abierta en un inicio y nos aparecerá la máquina virtual guardada bajo el nombre de *Ubuntu 20* en la parte superior izquierda, justo debajo de *Herramientas*.

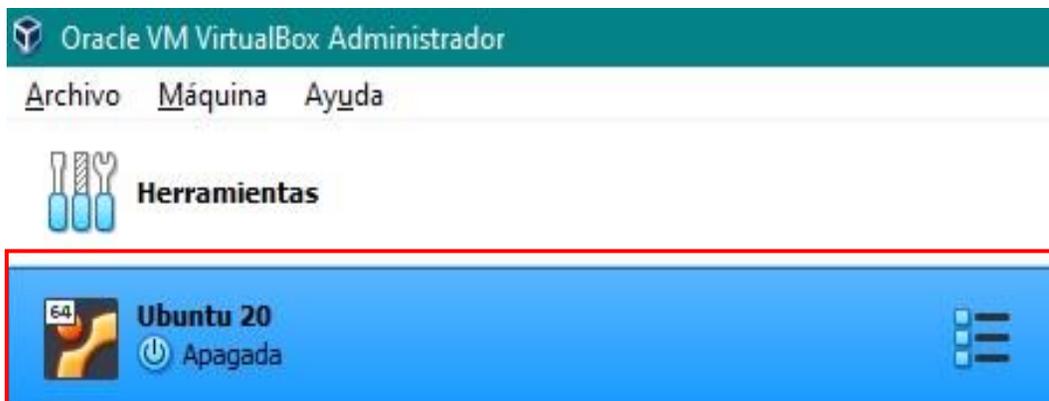
Lo siguiente será descargar Ubuntu 20 desde la página oficial, para ello ingresaremos a <https://ubuntu.com/>. Una vez dentro nos dirigimos a la pestaña *Download*, hacemos clic sobre ella y seleccionamos *Ubuntu Desktop*.



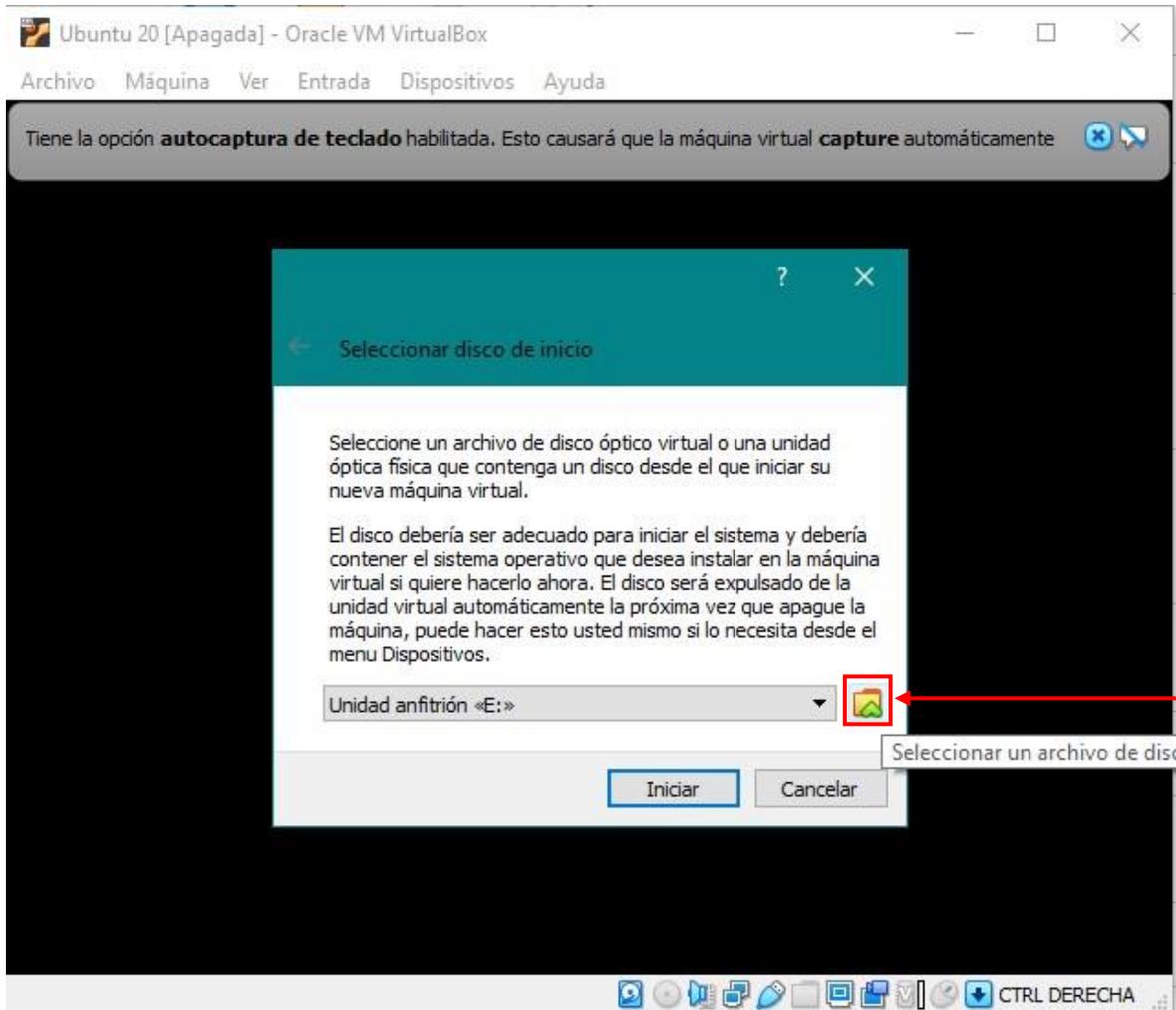
Daremos clic en *Download* y comenzará la descarga (el archivo pesa 2.67 GB).



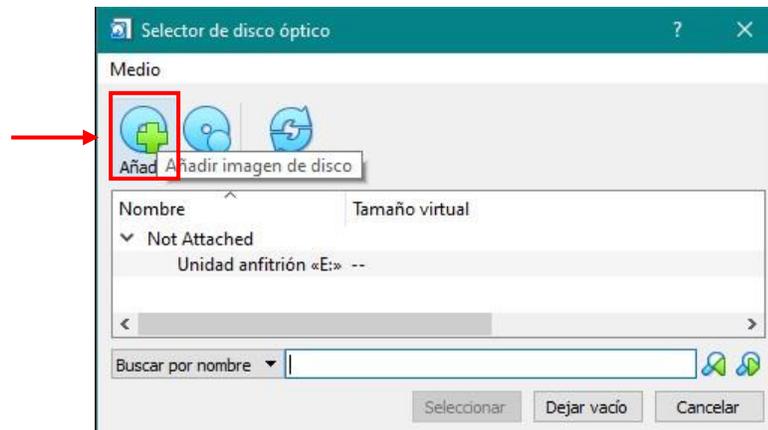
Finalizada la descarga regresaremos a la ventana abierta de VirtualBox y haremos doble clic sobre la máquina virtual.

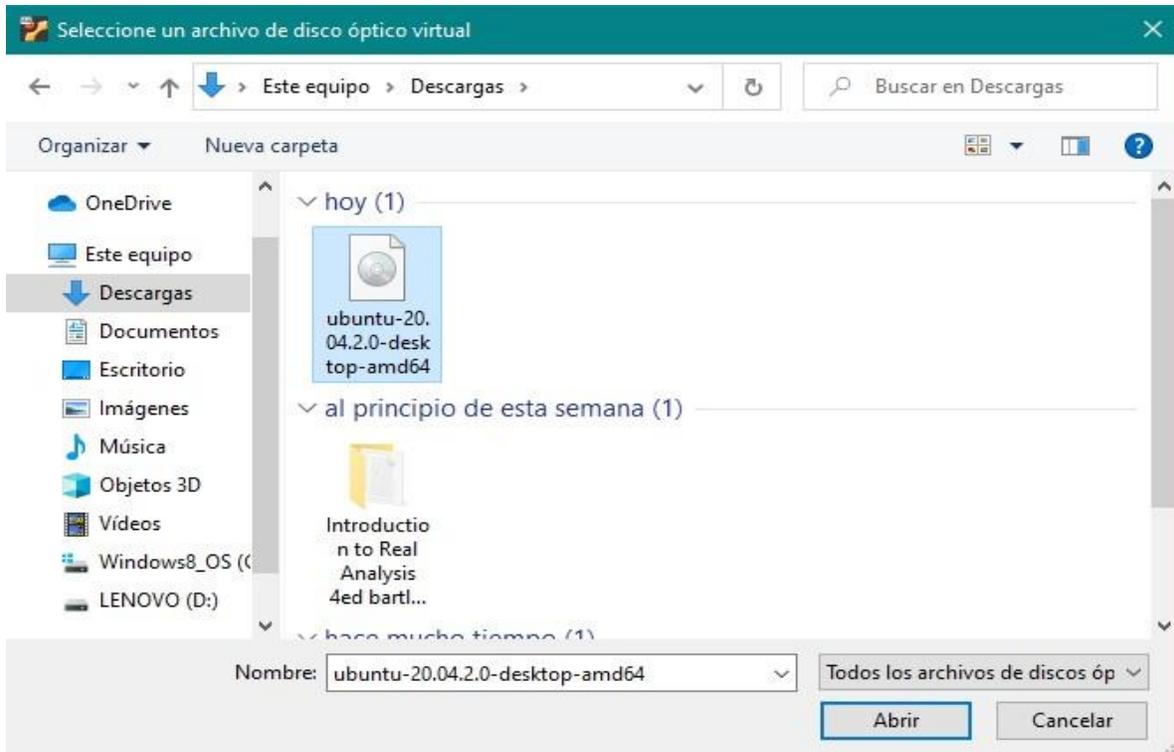


Se mostrará la siguiente ventana y haremos clic en el icono de la carpeta ubicado en la parte inferior derecha, sobre el botón *Cancelar*.

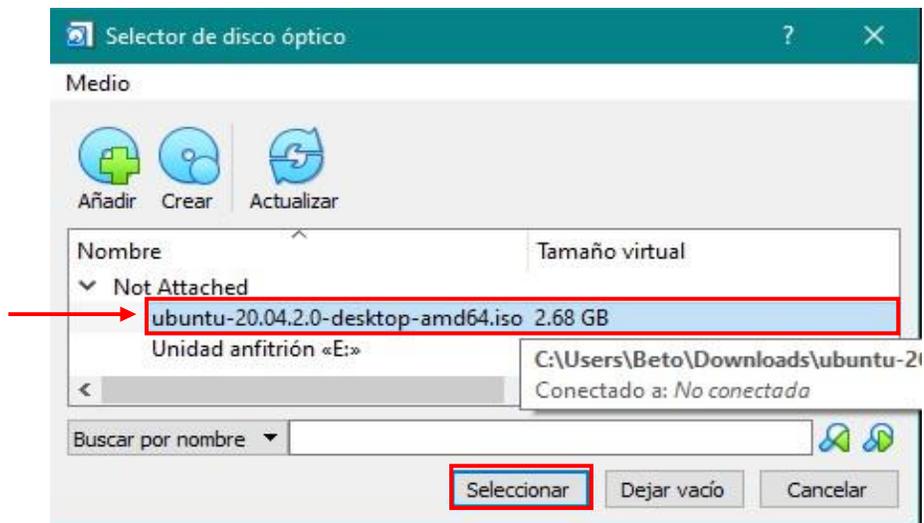


Se abrirá la siguiente ventana, y daremos clic en *Añadir* y en la ventana emergente seleccionaremos el archivo que acabamos de descargar (*ubuntu-20.04.2.0desktop-amd64*) y hacemos clic en *Abrir*.

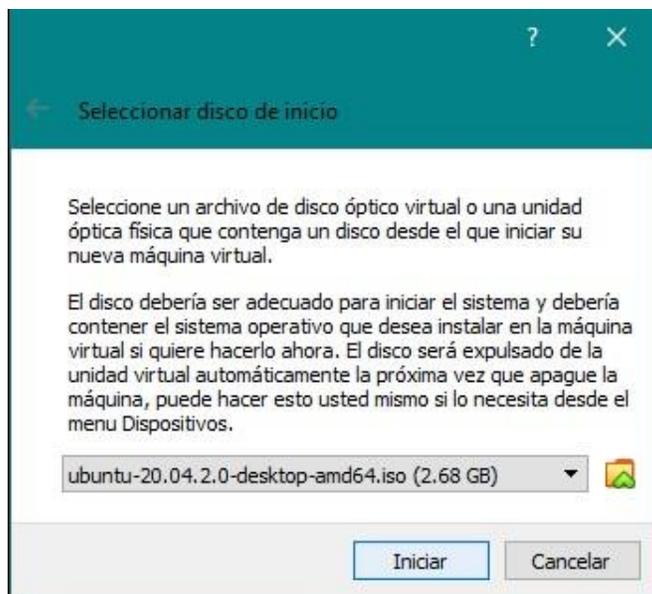




Hecho esto haremos clic en *ubuntu-20.04.2.0-desktop-amd64.iso* 2.68 GB y daremos clic en *Seleccionar*.



Después regresaremos a la primera ventana y haremos clic en *Iniciar*. El tiempo de inicio dependerá del ordenador que se esté usando, pasado ese tiempo seleccionaremos las opciones de instalación.



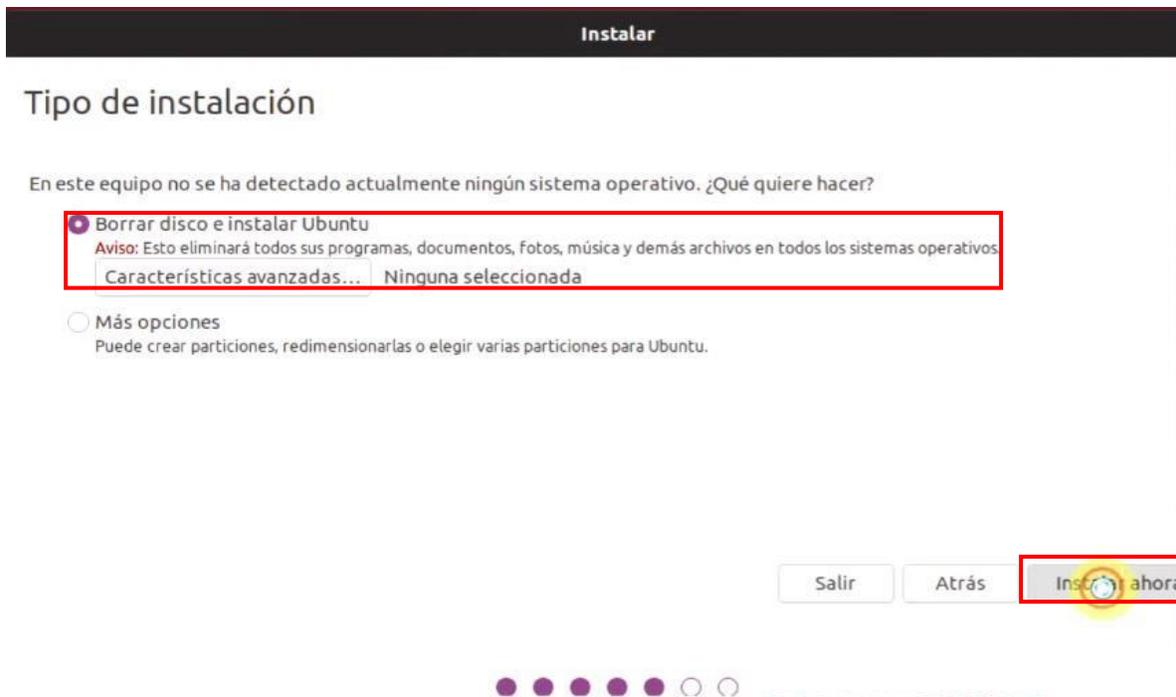
En la ventana que se mostrará seleccionaremos el idioma de nuestra preferencia para realizar la instalación y haremos clic en *Instalar Ubuntu*.



En la siguiente ventana seleccionaremos la distribución del teclado, así que una vez seleccionada la distribución de su preferencia daremos clic en *Continuar*.



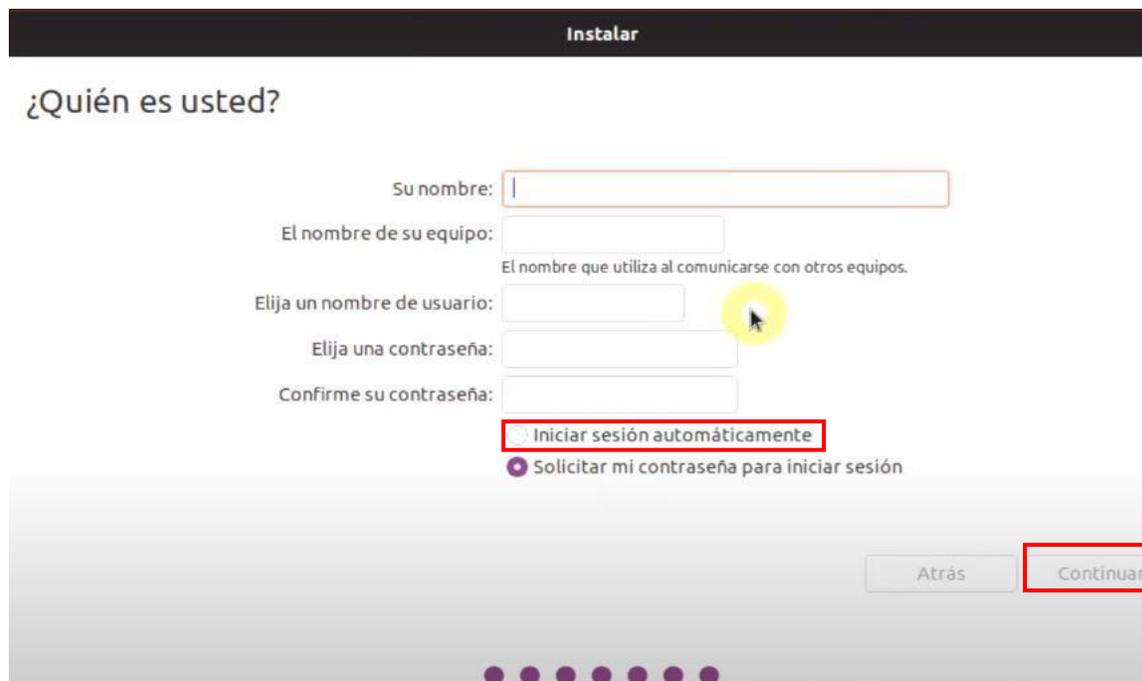
Y en la siguiente ventana seleccionaremos la opción *Borrar disco e instalar Ubuntu*. Luego daremos clic en el botón *Instalar ahora*.



Hecho esto, seleccionaremos nuestra ubicación en el mapa que se mostrará y haremos clic en *Continuar*.

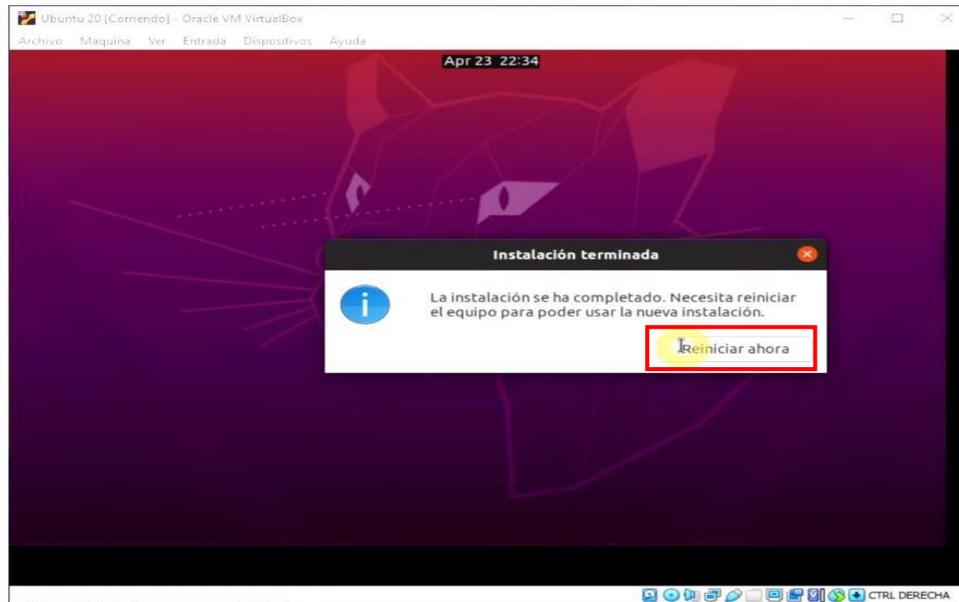


Por último, antes de comenzar con la instalación ingresaremos los datos de usuario. Aquí se recomienda marcar la casilla *Iniciar sesión automáticamente* para agilizar el proceso de inicio cada vez que se utilice la máquina virtual.

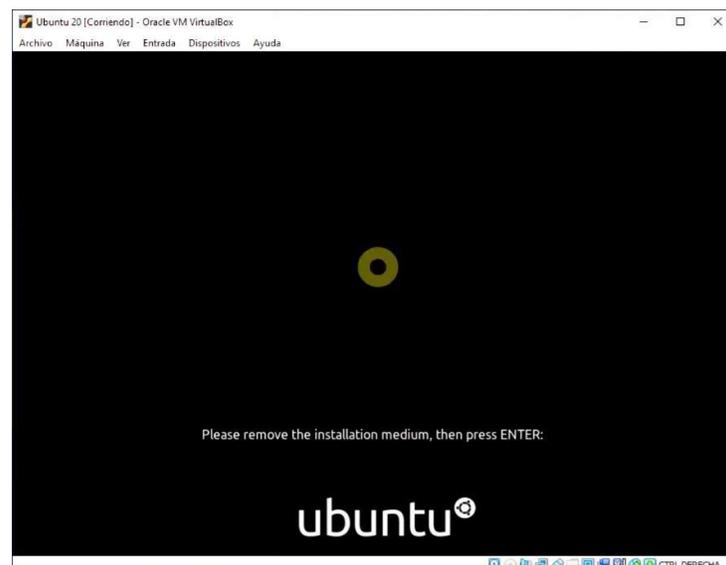


Una vez que hemos ingresado nuestros datos daremos clic en *Continuar* y comenzará la instalación de Ubuntu en nuestra máquina virtual.

Finalizada la instalación nos pedirá que reiniciemos el equipo (en este caso la máquina virtual). Daremos clic en *Reiniciar ahora*.



Finalmente, después de un tiempo (que dependerá de nuestro ordenador y de las características asignadas a nuestra máquina virtual), cuando se reinicie la máquina virtual veremos la siguiente pantalla, presionamos *ENTER* y listo, hemos finalizado.



En caso de tener dudas sobre los procedimientos realizados a lo largo de los apéndices A y B, puede consultar el siguiente enlace para ver un video explicativo sobre ambos procedimientos.



<https://www.youtube.com/watch?v=txkuu5BfrwE>

Así mismo, en caso de tener problemas al momento de ejecutar el material didáctico, se recomienda acudir al enlace anterior, puesto que en este video se instala la versión 18.04 de Ubuntu, la cual es más estable y en la cual no se han presentado inconvenientes para ejecutar el material didáctico.



APENDICE C

Uso de LINUX

Estar familiarizado con el sistema operativo es indispensable, y saber los comandos básicos para usar la terminal de LINUX es de suma importancia ya que mediante la correcta aplicación de estos es como se logra ejecutar el material didáctico. A continuación, se muestra el hipervínculo a un video tutorial sobre los conocimientos básicos que se deben tener del sistema operativo con el objetivo de ejecutar el programa de manera satisfactoria.

<https://www.youtube.com/watch?v=s3ii48qYBxA>



APENDICE D

Instalación de Gnuplot y Gfortran

Gnuplot es un programa que emplea la terminal de LINUX, y que es muy útil para crear gráficas de todo tipo con una enorme personalización.

Para verificar si ya está instalado abriremos la terminal y escribiremos gnuplot.

```
diana@diana-Inspiron-3558:~/Documentos$ gnuplot

G N U P L O T
Version 5.2 patchlevel 2    last modified 2017-11-01

Copyright (C) 1986-1993, 1998, 2004, 2007-2017
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

gnuplot home:      http://www.gnuplot.info
faq, bugs, etc:   type "help FAQ"
immediate help:   type "help" (plot window: hit 'h')

Terminal type is now 'wxt'
gnuplot> plot 'cuad.dat' u 1:2
Gtk-Message: 13:00:39.607: Failed to load module "canberra-gtk-module"
gnuplot> █
```

Si no se encuentra instalado aparecerá en la pantalla "no se ha encontrado la orden <<gnuplot>>" pero se puede instalar escribiendo `sudo apt install gnuplot-qt` en la terminal y luego podemos abrir el programa.

Gfortran es un compilador para el lenguaje de programación fortran cuyo uso principal es compilar código en un archivo ejecutable. Para instalarlo basta con escribir en la terminal `sudo apt-get install gfortran`.



```
carlos@Asus:~$ sudo apt-get install gfortran
Leyendo lista de paquetes... Hecho
Creando árbol de dependencias
Leyendo la información de estado... Hecho
Los paquetes indicados a continuación se instalaron de forma automática y ya no son necesarios.
  libpng-dev libpng-tools
Utilice «sudo apt autoremove» para eliminarlos.
Paquetes sugeridos:
  gfortran-multilib gfortran-doc
Se instalarán los siguientes paquetes NUEVOS:
  gfortran
0 actualizados, 1 nuevos se instalarán, 0 para eliminar y 0 no actualizados.
Se necesita descargar 1 352 B de archivos.
Se utilizarán 15.4 kB de espacio de disco adicional después de esta operación.
Des:1 http://archive.ubuntu.com/ubuntu bionic-updates/main amd64 gfortran amd64 4:7.3.0-3ubuntu2.1 [
1 352 B]
Descargados 1 352 B en 1s (1 893 B/s)
Seleccionando el paquete gfortran previamente no seleccionado.
(Leyendo la base de datos ... 444851 ficheros o directorios instalados actualmente.)
Preparando para desempaquetar .../gfortran_4%3a7.3.0-3ubuntu2.1_amd64.deb ...
Desempaquetando gfortran (4:7.3.0-3ubuntu2.1) ...
Configurando gfortran (4:7.3.0-3ubuntu2.1) ...
update-alternatives: utilizando /usr/bin/gfortran para proveer /usr/bin/f95 (f95) en modo automático
update-alternatives: utilizando /usr/bin/gfortran para proveer /usr/bin/f77 (f77) en modo automático
Procesando disparadores para man-db (2.8.3-2ubuntu0.1) ...
carlos@Asus:~$
```



APENDICE E

Arranque del programa.

Si el usuario no está familiarizado con el uso de este sistema operativo debe seguir los siguientes pasos para poder ejecutar el programa.

1. En el lado inferior izquierdo aparecerán 9 puntos a manera de cuadrado, le daremos clic y buscaremos la terminal.
2. Una vez abierta la terminal nos aparecerá la siguiente pantalla (con el nombre que el usuario allá ingresado en su ordenador), y escribiremos una `l` minúscula, la cual nos ayuda a buscar la carpeta en donde se encuentra el archivo que queramos abrir. En este caso se encuentra en la carpeta `Simulador` descargada previamente
3. Para abrir la carpeta en la terminal escribimos el comando `cd Simulador`.
4. Una vez hecho esto se pueden seguir con el paso 2 especificado en Instrucciones y especificaciones de uso.



Referencias

[1] Haile, J.M. (1997). *Molecular Dynamics Simulation*. USA: Wiley-Interscience.

[2] <http://www.gnuplot.info/>

[3] Taylor, D. DistroTube. (2021, enero 13). Beginner's Guide To The Linux Terminal. Recuperado de <https://www.youtube.com/watch?v=s3ii48qYBxA>

[4] Zambrano, A. Adrián Zambrano. (2020, marzo 17). Instalación de Ubuntu en VirtualBox. Recuperado de <https://www.youtube.com/watch?v=txkuu5BfrwE>