

# CARACTERIZACIÓN COMPUTACIONAL DE LA DIFUSIÓN EN UN SISTEMA UNIDIMENSIONAL DE PARTÍCULAS INTERACTUANTES EN RÉGIMEN HIDRODINÁMICO

COMPUTATIONAL CHARACTERIZATION OF ONE DIMENSIONAL DIFFUSION OF A SYSTEM OF PARTICLES ON HYDRODYNAMIC REGIME

E. NAVAS-CONYEDO<sup>at</sup>, C. M. PÉREZ-REYES<sup>a</sup>, C. TORRES-PUPO<sup>a</sup>, Y. COSTA-MARRERO<sup>a</sup>, J. GULÍN-GONZÁLEZ<sup>a</sup>

a) Grupo de Matemática y Física Computacional. Universidad de las Ciencias Informáticas (UCI), Carretera a San Antonio de los Baños, Km 2 ½, Torrens, Boyeros, La Habana, Cuba. CP. 19370; enavas@uci.cu<sup>†</sup>

<sup>†</sup> autor para la correspondencia

Keywords: Anomalous diffusion, single file diffusion, multiparticle collision dynamic PACS: 47.11.-j, 02.70.-c, 47.55.nb.

A partir de un modelo basado en un conjunto de partículas interactuantes según un potencial aproximado de esfera semirígida con régimen hidrodinámico simulado a través de la técnica dinámica de múltiples colisiones, se obtiene la aproximación del operador propagador difusivo bajo distintas condiciones iniciales. Se evalúa el impacto de las condiciones iniciales en la manifestación de la difusión anómala y sus parámetros así como la posibilidad de aplicar una aproximación local de las ecuaciones de la difusión dividiendo el dominio en secciones.

From a computational simulation for an softsphere approximation potential interacting particles system with hydrodynamic regime, granded by multiparticle collision dynamic techniques, an approximation for diffusive propagator is obtained on many initial conditions. The impact of initial conditions on diffusion parameters are evaluated and also the possibility of local sectional diffusion application.

## INTRODUCCIÓN

La modelación de la difusión en sistemas con alto confinamiento, en los que las estructuras que lo componen están fuertemente correlacionadas, es de interés por su potencial en la descripción predictiva de fenómenos complejos en sistemas biológicos. Para estos sistemas, en diversas situaciones, determinadas por las características morfológicas, termodinámicas e iniciales presentes, los modelos físico estadísticos tradicionales no son aplicables y se hace necesario acudir a modelos más generales como los que estudian la difusión anómala [1]. Un ejemplo característico lo constituye el comportamiento del microfluído sanguíneo presente en los capilares de los alviolos pulmonares donde el ancho de los capilares es comparable con el tamaño efectivo de los glóbulos rojos (GR) los que interactúan entre ellos de forma tal que no pueden sobrepasarse unos a los otros, este tipo de comportamiento se conoce en la literatura como difusión en una sola fila (*single file diffusion*, en inglés) [2, 3].

El tamaño típico de un GR es aproximadamente 7.5  $\mu\text{m}$ , pero este adapta su forma en correspondencia con las características del fluido convirtiéndose la interacción hidrodinámica un factor fundamental cuando el ancho del capilar oscila entre 3 y 8  $\mu\text{m}$  [4, 5, 6], en estas condiciones el movimiento de los

GR están muy correlacionados con un efecto marcado por el resultado de la interacción con las paredes del capilar y el plasma sanguíneo presente entre los GR adyacentes, que se manifiesta en el comportamiento anómalo de la difusión [6].

Una de las características distintivas de la difusión anómala es la dependencia como ley de potencia fraccionaria con el tiempo del desplazamiento medio cuadrático para valores de tiempo grandes, según la ecuación (1) [2] donde  $D_q$  es conocido como coeficiente de difusión anómalo y  $q$  exponente anómalo, en el caso específico de la difusión en una sola fila la tendencia general es a que  $q=1/2$ .

Las principales técnicas teóricas utilizadas para la descripción de la difusión anómala es el modelo del caminante aleatorio en espacio y tiempo continuo (CRTW por sus siglas en inglés) [7], la ecuación en derivadas fraccionarias de Fokker-Plank (FP) [8] y la ecuación principal de evolución (*ME: Master Equation* en Inglés) [9, 7], ver ecuación (2). Esta última es muy difícil de aplicar pues es necesario conocer las características del operador de evolución  $\hat{M}$ , el cual puede ser no lineal en ciertos dominios y depende de las características morfológicas e iniciales, además no es posible a priori conocer con exactitud

su comportamiento siendo necesario utilizar información adicional a partir de datos experimentales o simulaciones computacionales.

$$rms_q(t) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2D_q t^q \quad (1)$$

$$\rho(x, t) = \hat{M}(x, t, \rho(x, t))\rho(x, 0) \quad (2)$$

Desde el punto de vista computacional la técnica ME brinda la posibilidad de obtener una aproximación a su operador puesto que este es la solución de la ecuación (2) cuando la función de densidad de partículas posee como condición inicial una aproximación a  $\rho(x, 0) \approx \delta(x)$  donde  $\delta(x)$  es la delta de Dirac. La mayor dificultad de su aplicación radica en su no linealidad pues en general  $\rho(x, t) = \hat{M}(\rho_1(x, 0) + \rho_2(x, 0)) \neq \hat{M}\rho_1(x, 0) + \hat{M}\rho_2(x, 0)$  y el valor de la densidad en cierta posición y tiempo está correlacionada con las existentes en todo el dominio para tiempos anteriores [7]. En el presente trabajo mostramos a través del uso de herramientas computacionales aplicadas a un sistema unidimensional de partículas interactuantes en régimen hidrodinámico, simulado utilizando la técnica computacional de colisiones múltiples (MPC) para el fluido y dinámica molecular (GCMD) para un ensemble gran canónico, la posibilidad de dividir el sistema de estudio en elementos de longitud  $S$ , de forma tal, que si la función de densidad inicial se subdivide en estos intervalos según  $\rho_o(x) = \rho(x, 0) = \sum_i g_i(x)$  donde  $g_i(x) = \rho_o(x)(\Theta(x - ns) - \Theta(x - (n+1)S))$  con  $n \in \mathbb{Z}$  y  $\Theta$  la función de paso unitario, se pueda linealizar el operador  $\hat{M}$  como  $\rho(x, t) = \sum_i \hat{M}g_i(x)$ . Esta propuesta permite acotar el dominio de estudio para el operador de evolución pudiéndose extender su aplicación al resto del dominio.

## MODELO COMPUTACIONAL

Como sistema de estudio hemos escogido una simplificación unidimensional de un conjunto de  $N$  GR dentro de un capilar de longitud  $L$  y ancho  $W$  que interactúa bajo un potencial modificado similar a los utilizados en las referencias [10, 11] tipo esfera semirígida según la ecuación (3), el cual representa de forma efectiva la plasticidad de los GR de tamaño máximo  $d$ , que poseen producto del confinamiento una distancia límite  $d_h$  para sus acercamiento, siendo  $r$  la distancia entre los centros geométricos de dos GR vecinos, ver figura 1. La evolución de los GR se realiza utilizando la técnica computacional GCMD [12].

$$U(r) = \begin{cases} \infty & r \leq d_h \\ 20K_B T \exp(-100\|r - d_h\|) & d_h \leq r < d \\ 0 & r \geq d \end{cases} \quad (3)$$

El fluido circundante, en este caso el plasma sanguíneo, es simulado a través de la técnica computacional MPC en su variante que incluye de manera efectiva un termostato de Andersen denominada MPC-AT-a, ver las referencias [13, 14], la cual subdivide al fluido solvente en un conjunto de  $N_s$  partículas distribuido en  $M$  cajas de simulación de origen aleatorio para lograr invarianza galileana, que poseen una evolución determinada por dos pasos. El primer paso simula

las interacciones entre las partículas del fluido a través del intercambio de momento lineal en cada caja conservando el momento total y la energía, ecuación (4), donde  $V_j^{CM}$  es la velocidad del centro de masa de las partículas de la caja  $j$  que poseen masa  $m_j$  y  $v_i^{rand}$  es generado aleatoriamente según una distribución de Maxwell-Boltzman para la energía térmica  $K_B T$ . En el segundo las partículas se mueven libremente en trayectorias balísticas, ecuación (5). La interacción entre los GR y el fluido se realiza a través de su inclusión en el paso de colisiones en cada caja. Este método híbrido ha obtenido resultados correctos en varias simulaciones similares al propuesto [14, 15].

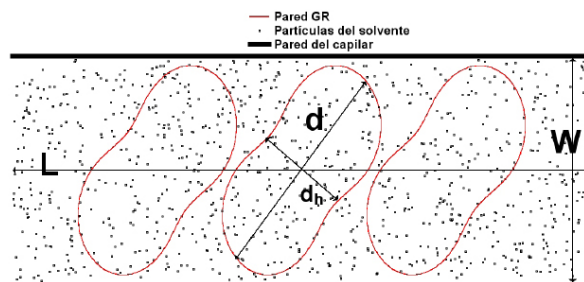


Figura 1. Diseño estructural del sistema de estudio.

$$\tilde{v}_i = V_j^{CM} + v_i^{rand} - \frac{\sum_{i \in Box_j} m_i v_i^{rand}}{\sum_{i \in Box_j} m_i} \quad (4)$$

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + \tilde{v}_i \Delta t \quad (5)$$

La interacción del fluido y los GR con la pared del capilar se ha realizado considerando que una fracción de ellos sufren inversión de sus velocidades, esto de manera efectiva caracteriza el intercambio de momento correspondiente a un fluido newtoniano en la vecindad de una frontera inmóvil [16]. La fracción del solvente que interactúa con las paredes se estima según  $\frac{4}{W} \sqrt{\frac{K_B T}{2\pi m}} \Delta T$ , donde se ha considerado su comportamiento similar a un gas ideal. Para los GR se ha considerado que al disminuir el ancho del canal la superficie de contacto aumenta en la misma medida que la fracción que sufre intercambio de según  $\left(\frac{d-W}{W+d_h}\right)^2$  cuando  $W < d$ .

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para obtener la aproximación computacional del operador  $\hat{M}$  se utilizó un conjunto de  $N=500$  partículas de masa  $m_p=1$  (unidad de masa) separadas en una distancia de equilibrio  $d=1$  (unidad de longitud), de esta forma se logra la mayor concentración en equilibrio como aproximación física a una distribución inicial tipo  $g_o(x, N, d, l) \sim \delta(x - L/2)$ , ecuación (6) a la que nos referiremos como configuración inicial durante el análisis, donde  $L$  es el largo del capilar. La temperatura del sistema fue fijada según  $K_B T=1$  (unidad de energía), generando un conjunto de 100 condiciones iniciales aleatorias para las velocidades según la distribución de Maxwell para cada simulación. El ancho del capilar fue escogido como  $W=0.99d$ , de forma tal que existe una fracción estimada interacción

de los GR con la superficie de 0.01. El largo del capilar es de  $L=2000d$ , de esta forma se garantiza que exista una fracción de volumen del 45% de GR respecto al volumen total del sistema [5]. El fluido es simulado utilizando MPC-AT-a, usando para el ancho de las cajas  $a=d$ , existiendo un total de cajas de  $N_B=2000$  donde hay un promedio de 10 partículas de masa  $m_f=0.01m_p$ . Como unidad de tiempo de simulación hemos utilizado  $t_o = d\sqrt{2m_p/K_B T}$ , utilizando  $\Delta t_{MPC}=0.001t_o$  para el lapso de tiempo de las iteraciones de MPC-AT-a y  $\Delta t_{GCMD}=0.001t_{MPC}$ , de esta forma se logra que la viscosidad del fluido sea alta, correspondiente a un número de Reynolds bajo y estabilidad en la solución [15] lo cual se corresponde con la situación real del fluido sanguíneo. En el eje longitudinal se ha considerado condiciones periódicas de frontera.

$$g(x, N, D, L) = \frac{\Theta(x - \frac{L - Nd}{2}) - \Theta(x - \frac{L + Nd}{2})}{Nd} \quad (6)$$

Las condiciones iniciales se varían cambiando la distribución inicial simulada, utilizando un conjunto de  $N=1000$  partículas concentradas separadas en dos paquetes de 500 partículas según:

$$g_s(x) = [g_o(x - 0.5S, 500, d, L) + g_o(x + 0.5S, 500, d, L)] / 2 \quad \text{para } S = \{500, 600, 800\}d.$$

En la figura 2 se observa el comportamiento promedio de la desviación cuadrática media normalizada según la primera iteración  $rms(t)/rms(0)$  para los distintos valores de  $S$ . Para valores pequeños de tiempo  $t/t_o \in \{20, 60\}$  se evidencia un crecimiento lento que va disminuyendo con el aumento de  $S$ , este comportamiento se corresponde con el proceso de estabilización de las interacciones entre las partículas y el fluido, con aumento de  $S$  estas interacciones están más espacialmente distribuidas contribuyendo a alcanzar más rápido un estado estable para el intercambio de momentum en el paso de colisiones de MPC-AT-a. Para tiempos  $t/t_o \in \{20, 60\}$  se observa un incremento promedio casi lineal, en todos los casos de pendiente similar, esto se debe al proceso de desagrupación de las partículas donde prevalece solo la interacción de estas con el fluido provocando una tendencia hacia la difusión normal.

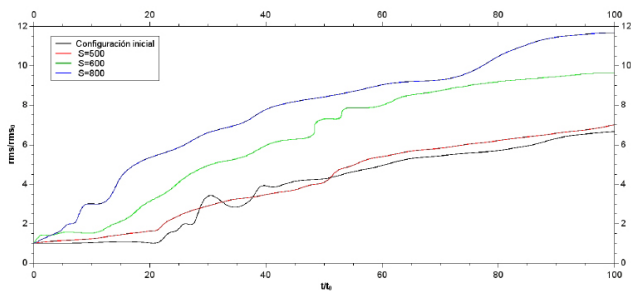


Figure 2. Comportamiento de la desviación cuadrática media normalizada para las distintas condiciones iniciales.

Para  $t/t_o > 60$  el proceso de difusión se hace más lento producto de la homogenización de la distribución de las partículas interactuantes lo que provoca un aumento de la

frecuencia de colisiones entre las partículas, con un aumento de las correlaciones que desencadenan un comportamiento anómalo con una dependencia próxima  $rms/rms_o \propto \sqrt{t/t_o}$ , con el aumento de  $S$  se observa que el valor de tiempo donde se retoma el comportamiento anómalo es menor pues su aumento contribuye a la homogenización de la distribución de partículas. Este comportamiento general es muy similar al obtenido en simulaciones bidimensionales en la referencia [17].

A partir de las funciones de distribución obtenidas para cada momento de simulación  $\rho_s(x, t) = \hat{M}g_s(x)$  obtenemos la diferencia comparativa promedio, de las 100 condiciones iniciales aleatorias de las velocidades, con  $\tilde{\rho}_s(x, t) = [\hat{M}g_o(x - 0.5S, 500, D, L) + \hat{M}g_o(x + 0.5S, 500, D, L)] / 2$  utilizando  $Diff_s = 1/T \int_0^T dt \int dx \|\rho_s(x, t) - \tilde{\rho}_s(x, t)\|$  como parámetro de mérito, el cual muestra la linealidad del operador  $\hat{M}$ . Para  $S=500$  se tiene en realidad un único conglomerado de 1000 partículas agrupadas interactuantes cuyo comportamiento se diferencia significativamente con el correspondiente a la situación inicial de simulación. En la medida que  $S$  aumenta disminuye la correlación entre las distribuciones de las agrupaciones, este comportamiento se muestra en la figura 3, entre  $S=500$  y 800 hay alrededor de 3 órdenes de magnitud de diferencia lo que muestra una tendencia a la linealidad de  $\hat{M}$  que puede ser utilizada para subdividir el dominio para realizar estudios posteriores más detallados.

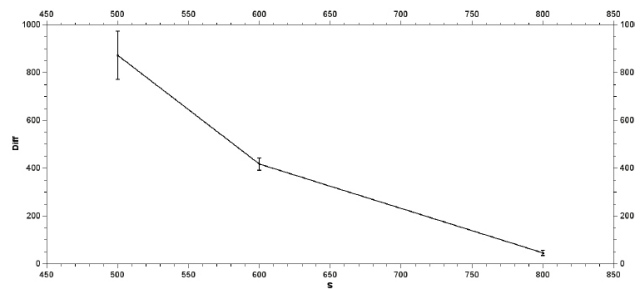


Figure 3. Cuantificación de la diferencia al aplicar el operador de evolución como método para evaluar su linealidad.

## CONCLUSIONES

Se obtuvo una aproximación del operador de evolución para un sistema unidimensional con alto confinamiento que reproduce de manera simplificada la difusión de células de glóbulos rojos en capilares. Se estudió el comportamiento promedio de la desviación cuadrática: para valores de tiempo cortos se observa un crecimiento lento que va disminuyendo con el aumento de  $S$ , este comportamiento se corresponde con el proceso de estabilización de las interacciones entre las partículas y el fluido; para tiempos intermedios se observa un incremento promedio casi lineal lo que se explica por el proceso de desagrupación de las partículas en el que prevalece la interacción de estas con el fluido provocando una tendencia hacia la difusión normal; para tiempos largos el proceso de difusión se hace más lento como resultado de la homogenización de la distribución de las partículas lo que provoca un aumento de la frecuencia de colisiones entre las partículas, con un aumento de las

correlaciones que desencadenan un comportamiento anómalo. El comportamiento descrito reproduce correctamente el comportamiento general del microfluido sanguíneo con alto grado de confinamiento y es muy similar a lo obtenido en simulaciones bidimensionales [17] y al esperado en el sistema real [4].

#### AGRADECIMIENTOS

Agradecemos la colaboración con el Centro de Simulaciones Avanzadas del Forchungzentrum Juelich en Alemania y al proyecto institucional de Caracterización Computacional de Sistemas Difusivos de la Universidad de las Ciencias Informáticas que han dado soporte logístico y metodológico para la realización del presente trabajo.

---

[1] E. K. Lenzi, R. S. Mendes, K. S. Fa, L. C. Malacarne and L. R. da Silva, *Journal of Mathematical Physics* 44, 2179 (2003).  
[2] P. Demontis and G. B. Suritti, *Phys Rev E* 74, 051112 (2006).  
[3] T. Ambjörnsson, L. Lizana, M. A. Lomholt and R. J. Silbey, *The Journal of Chemical Physics* 129, 185106 (2008).

[4] S. Chien, *Annual Review of Physiology* 49, 177 (1987).  
[5] A. Kratz, M. Ferraro, P. M. Sluss and K. B. Lewandrowski, *New England Journal of Medicine* 351, 1548 (2004).  
[6] H. Zhao and E. S. G. Shaqfeh, *Phys Rev E* 83, 061924 (2011).  
[7] E. Barkai, *Chemical Physics* 284, 13 (2002).  
[8] K. S. F. L. C. M. E. K. Lenzi, R. S. Mendes and L. R. da Silva, *J Math Phys* 44, 2179 (2003).  
[9] A. M. Gianni Pagnini and F. Mainardi, *International Journal of Stochastic Analysis* 2012, 14 (2012).  
[10] M. Marchesi, *Chemical Physics Letters* 97, 224 (1983), ISSN 0009-2614.  
[11] F. Stillinger and T. Weber, *Phys Rev B* 31, 5262 (1985).  
[12] S. Boinepalli and P. Attard, *J Chem Phys* 119, 12769 (2003).  
[13] K. Tucci and R. Kapral, *The Journal of Physical Chemistry B* 109, 21300 (2005). PMID: 16853762.  
[14] H. Noguchi, N. Kikuchi and G. Gompper, *EPL (Europhysics Letters)* 78, 10005 (2007).  
[15] I. O. Götze, H. Noguchi and G. Gompper, *Phys Rev E* 76, 046705 (2007).  
[16] I. Rao and K. Rajagopal, *Acta Mechanica* 135, 113 (1999), ISSN 0001-5970.  
[17] J. Sane, J. T. Padding and A. A. Louis, *Faraday Discuss* 144, 285 (2010)