



Casa abierta al tiempo
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

Simulador estadístico de trayectorias difusivas de partículas brownianas en un canal cónico 2D

Tesis para obtener el grado de Doctora en Ciencias
(Doctora en Ciencias y Tecnologías de la Información)

M. en C. Adriana Pérez Espinosa

Asesores:

Dr. Manuel Aguilar Cornejo
Dr. Leonardo Dagdug Lima

Jurado calificador:

Presidente:
Secretario:
Vocal: Dr.
Vocal: Dr.
Vocal: Dr.

Ciudad de México
Diciembre 2025

Agradecimientos

A **mis padres, mis ángeles**, porque gracias a su apoyo, su guía y su confianza pude continuar con mis estudios. De ellos siempre recibí amor y apoyo incondicional. Besos hasta el cielo.

A mis hermanas, **Maru y Gaby**, por estar siempre a mi lado, apoyar mis decisiones y ser un ejemplo en mi vida. A mis sobrinos, **Andrea y Aldo**, cuya risa y cariño me han acompañado.

A mis asesores, el **Dr. Manuel Aguilar C. y el Dr. Leonardo Dagdug Lima**, por su apoyo y asesoramiento en esta investigación y en la elaboración de esta tesis, así como por la confianza depositada en mí.

Al **Dr. Miguel A. Castro**, a la **Dra. Graciela Román A.** y a la **Dra. Elizabeth Pérez C.**, por el apoyo y los consejos brindados a lo largo de mi camino en la UAM.

Al **Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Conacyt)**, por la beca otorgada durante mi estancia en el doctorado.

A la **Universidad Autónoma Metropolitana (UAM)**, por el apoyo constante recibido de esta institución, mi casa de estudios.

A todos los integrantes del Posgrado en Ciencias y Tecnologías de la Información, así como a mis amigos y profesores, gracias por su apoyo, sin el cual no estaría donde me encuentro hoy. En especial, agradezco al **Dr. Luis Alberto Vázquez Toledo** por brindarme siempre la confianza para resolver cualquier duda.

De manera muy especial, deseo agradecer a mi esposo, **José Luis**, por ser mi apoyo incondicional y motivarme siempre a seguir creciendo, incluso en los momentos más difíciles. Y a mi hijo, **Damián**, porque sin duda es quien me impulsa a ser mejor cada día; él es, y siempre será, lo más importante para mí, y quien me ha enseñado a ser mamá, a ser una mejor profesora y una mejor persona.

Resumen

La difusión es un proceso en el que las partículas se desplazan de manera aleatoria debido a los choques con el medio que las rodea. Cuando este movimiento ocurre dentro de un canal difusivo, la geometría del confinamiento puede alterar de forma significativa las trayectorias y los tiempos característicos del proceso. Algunas de las herramientas computacionales que simulan este fenómeno permiten visualizar el movimiento, pero no permiten realizar un análisis más profundo de las trayectorias ni trabajar con geometrías configurables.

Como contribución de esta tesis se desarrolló DiffConf, un simulador de la difusión confinada de partículas diseñado específicamente para modelar el movimiento de partículas en canales cónicos bidimensionales con geometría ajustable. Este simulador se basa en la Dinámica Browniana y permite incorporar variaciones controladas en la apertura y longitud del canal, obteniendo así una herramienta que permite estudiar cómo la estructura del canal afecta el comportamiento difusivo. Para ello, DiffConf integra un algoritmo paralelo parametrizado que puede ejecutarse tanto en CPU multinúcleo como en GPU, lo que permite acelerar significativamente la simulación del proceso y manejar un número grande de partículas de forma eficiente.

Adicionalmente, se desarrolló VisUAM (Visualizador UAM), una plataforma web orientada al análisis, procesamiento y visualización de los datos generados por el simulador DiffConf, así como de otras herramientas científicas desarrolladas por investigadores de la UAM, mediante representaciones en 2D, 3D y animaciones.

La versión actual de *VisUAM* permite la visualización de: redes porosas, diagramas de voronoi y trayectorias difusivas. La arquitectura de **VisUAM** permite integrar fácilmente cualquier tipo de dato y soporta visualizaciones multidimensionales, incluyendo 2D, 3D y animaciones. Su flexibilidad, accesibilidad web y capacidad de adaptación a nuevas necesidades de visualización convierten a VisUAM en una plataforma versátil.

Índice general

| | |
|--|------------|
| Índice de figuras | vii |
| Índice de tablas | ix |
| 1. Introducción | 1 |
| 1.1. Motivación | 2 |
| 1.2. Objetivos | 3 |
| 1.2.1. Objetivos Particulares | 4 |
| 1.3. Organización de la tesis | 4 |
| 2. Marco Conceptual | 6 |
| 2.1. Conceptos básicos del proceso de difusión | 6 |
| 2.1.1. Fundamentos de la difusión: las leyes de Fick | 7 |
| 2.1.2. Coeficiente de Difusión | 8 |
| 2.2. Difusión confinada | 9 |
| 2.2.1. Fronteras del canal difusivo | 10 |
| 2.2.2. Propiedades de las fronteras del canal difusivo | 10 |
| 2.2.3. Movimiento de las partículas en el canal difusivo | 12 |
| 2.2.4. Conceptos básicos de las trayectorias difusivas | 14 |
| 2.3. Difusión confinada en canales cónicos | 14 |
| 2.3.1. Estudio de canales cónicos tridimensionales (Tubos) | 15 |
| 2.3.2. Estudio de canales cónicos en 2D | 19 |
| 3. Estado del Arte | 27 |
| 3.1. Simulaciones computacionales | 27 |
| 3.2. Simulación del proceso difusivo confinado | 28 |
| 3.3. Niveles de modelado en la simulación del proceso difusivo confinado | 29 |

ÍNDICE GENERAL

| | |
|---|-----------|
| 3.4. Herramientas para la simulación de la difusión de partículas brownianas | 30 |
| 4. Simulador DiffConf | 37 |
| 4.1. Modelado del sistema | 38 |
| 4.1.1. Modelación de partículas y su movimiento | 38 |
| 4.1.2. Modelado de la difusión mediante caminatas aleatorias . . | 39 |
| 4.1.3. Modelación de la interacción de las partículas con el medio de confinamiento. | 40 |
| 4.2. Arquitectura del simulador DiffConf | 43 |
| 4.2.1. Módulo controlador de la interfaz de usuario | 43 |
| 4.2.2. Módulo núcleo de la simulación de la difusión | 46 |
| 4.2.3. Implementación del simulador DiffConf usando paralelización multinúcleo | 51 |
| 4.2.4. Implementación del simulador DiffConf usando paralelización multinúcleo | 52 |
| 4.3. Módulo de análisis estadístico de trayectorias. | 56 |
| 4.4. VisUAM: Una herramienta web para la visualización de datos en investigación científica | 58 |
| 4.5. Descripción de VisUAM | 59 |
| 4.6. Formato *.vsm | 61 |
| 4.7. Diseño de VisUAM | 62 |
| 4.7.1. <i>Interfaz FileModelInterface</i> | 63 |
| 4.8. Visualización de Partículas: Clase Partículas | 64 |
| 4.8.1. <i>Formato *.vsm para partículas</i> | 64 |
| 5. Resultados | 68 |
| 5.1. Evaluación de la correctitud | 68 |
| 5.1.1. Canal cónico en expansión ($n \rightarrow w$). | 69 |
| 5.1.1.1. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de primer arribo τ_{2Dfpt} | 69 |
| 5.1.1.2. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito directo τ_{2Dtpt} | 71 |
| 5.1.1.3. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito cíclico τ_{2Dlt} | 72 |
| 5.1.2. Canal cónico que se estrecha ($w \rightarrow n$). | 74 |
| 5.1.2.1. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de primer arribo τ_{2Dfpt} | 74 |
| 5.1.2.2. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito directo τ_{2Dtpt} | 75 |

ÍNDICE GENERAL

| | |
|---|-----|
| 5.1.2.3. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito cíclico τ_{2Dlt} | 77 |
| 5.2. Análisis de trayectorias basado en los datos obtenidos de la simulación | 78 |
| 5.2.1. Comparación de los tiempos medios de tránsito directo obtenidos de las simulaciones en canales. | 78 |
| 5.2.2. Interacción de las partículas con las paredes transversales del canal expansivo. | 79 |
| 5.2.3. Interacción de las partículas con las paredes longitudinales del canal expansivo. | 82 |
| 5.2.4. Comparación del número de interacciones que tienen las partículas por pared | 83 |
| 5.3. Análisis de tiempos de ejecución | 84 |
| 5.4. Visualización de la difusión confinada de partículas | 86 |
| | |
| 6. Conclusiones y trabajo a futuro | 89 |
| | |
| A. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de primer arribo τ_{2Dfpt} para un canal cónico que se expande $n \rightarrow w$ | 93 |
| | |
| B. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito directo τ_{2Dtpt} para un canal cónico que se expande $n \rightarrow w$. | 96 |
| | |
| C. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito cíclico τ_{2Dlt} para un canal cónico que se expande $n \rightarrow w$. | 99 |
| | |
| D. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de primer arribo τ_{2Dfpt} para un canal cónico que se estrecha $w \rightarrow n$ | 102 |
| | |
| E. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito directo τ_{2Dtpt} para un canal cónico que se estrecha $w \rightarrow n$ | 105 |
| | |
| F. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito cíclico τ_{2Dlt} para un canal cónico que se estrecha $w \rightarrow n$ | 108 |

ÍNDICE GENERAL

Bibliografía 111

Índice de figuras

| | |
|--|----|
| 2.1. Proceso de difusión | 7 |
| 2.2. Movimiento browniano | 7 |
| 2.3. Difusión confinada | 9 |
| 2.4. Tipos de fronteras | 10 |
| 2.5. Frontera absorbente | 11 |
| 2.6. Frontera reflejante | 12 |
| 2.7. Movimiento aleatorio de una partícula en pasos de longitud d durante intervalos Δt | 12 |
| 2.8. Trayectoria difusiva en un sistema confinado | 14 |
| 2.9. Canal cónico tridimensional | 16 |
| 2.10. Comparación de los tiempos medios de primer arribo y de tránsito directo en función de λ | 19 |
| 2.11. Canal cónico bidimensional | 20 |
| 4.1. Arquitectura del simulador DiffConf | 43 |
| 4.2. Interfaz del simulador DiffConf | 44 |
| 4.3. Diagrama del algoritmo que simula la difusión de una partícula en el simulador DiffConf | 47 |
| 4.4. Diagrama del algoritmo que simula la difusión de varias partículas en el simulador DiffConf | 48 |
| 4.5. Subdivisión espacial del problema | 49 |
| 4.6. GPU CUDA | 52 |
| 4.7. Organización jerárquica de los hilos | 53 |
| 4.8. Asignación de tareas en una GPU | 54 |
| 4.9. Flujo de ejecución en la GPU | 55 |
| 4.10. Ejemplo de elementos visuales. | 59 |
| 4.11. Interfaz de usuario. | 60 |
| 4.12. Proceso para generar una visualización | 60 |
| 4.13. Diagrama de interacción/comunicación usuario-VisUAM. | 62 |
| 4.14. Diagrama de Clases | 63 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| 5.1. Gráficas de las interacciones partícula–pared transversal superior en un canal expansivo | 80 |
| 5.2. Gráficas de las interacciones partícula–pared transversal inferior en un canal expansivo | 81 |
| 5.3. Gráficas de las interacciones partícula–pared longitudinal reflejante en un canal expansivo | 82 |
| 5.4. Frecuencia de interacciones por pared del canal para distintos valores de λ | 84 |
| 5.5. Visualización de partículas brownianas en canales bidimensionales. | 86 |
| 5.6. Menú del módulo de visualización de partículas. | 87 |
| 5.7. Partículas con la opción trayectorias seleccionada. | 87 |
| 5.8. Partícula aislada | 88 |
| 5.9. Gráficas de resultados | 88 |

Índice de tablas

| | |
|---|----|
| 3.1. Comparativa de los simuladores de partículas en sistemas confinados. | 36 |
| 5.1. Comparación de los resultados para el tiempo medio de primer arribo para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones. | 70 |
| 5.2. Porcentaje de error del tiempo medio de primer arribo para la difusión de $n \rightarrow w$. | 70 |
| 5.3. Comparación de los resultados para el tiempo de tránsito directo para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones. | 71 |
| 5.4. Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $n \rightarrow w$. | 72 |
| 5.5. Comparación de los resultados para el tiempo de tránsito cíclico para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones. | 73 |
| 5.6. Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $n \rightarrow w$. | 73 |
| 5.7. Comparación de los resultados para el tiempo medio de primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones. | 74 |
| 5.8. Porcentaje de error del tiempo medio de primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$. | 75 |
| 5.9. Comparación de los resultados para el tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones. | 76 |
| 5.10. Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $w \rightarrow n$. | 76 |
| 5.11. Comparación de los resultados para el tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones. | 77 |
| 5.12. Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $w \rightarrow n$. | 78 |

ÍNDICE DE TABLAS

| | |
|---|-----|
| 5.13. Comparación del tiempo medio de tránsito directo obtenido de las simulaciones en canales que se expanden y canales que se estrechan. | 79 |
| 5.14. Cantidad de interacciones con la pared transversal superior. | 80 |
| 5.15. Cantidad de interacciones con la pared transversal inferior. | 81 |
| 5.16. Cantidad de interacciones con la pared longitudinal reflejante. . . | 82 |
| 5.17. Frecuencia de interacciones por pared del canal cuando $\lambda = 0$. . . | 83 |
| 5.18. Comparación de tiempos de ejecución con y sin trayectorias cuando $\lambda = 0$ y la longitud es de 20 en un canal expansivo | 85 |
| 5.19. Comparación de tiempos de ejecución con y sin trayectorias cuando $\lambda = 1,2$ y la longitud es de 20 | 85 |
| | |
| A.1. Tiempo medio de primer arribo de $n \rightarrow w$ obtenido por simulaciones | 94 |
| A.2. Tiempo medio de primer arribo de $n \rightarrow w$ obtenido por las predicciones analíticas | 94 |
| A.3. Comparación de los resultados para el tiempo medio de primer arribo para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones. | 95 |
| A.4. Porcentaje de error del tiempo medio de primer arribo para la difusión de $n \rightarrow w$ | 95 |
| | |
| B.1. Tiempo medio de tránsito directo de $n \rightarrow w$ obtenidas de las simulaciones | 97 |
| B.2. Tiempo medio de tránsito directo de $n \rightarrow w$ obtenidas de las predicciones | 97 |
| B.3. Comparación de los resultados para el tiempo de tránsito directo para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones. | 98 |
| B.4. Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $n \rightarrow w$ | 98 |
| | |
| C.1. Tiempo medio de tránsito cíclico de $n \rightarrow w$ obtenidas de las simulaciones | 100 |
| C.2. Tiempo medio de tránsito cíclico de $n \rightarrow w$ obtenidas de las predicciones | 100 |
| C.3. Comparación de los resultados para el tiempo de tránsito cíclico para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones. | 101 |
| C.4. Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $n \rightarrow w$ | 101 |
| | |
| D.1. Tiempo medio de primer arribo de $w \rightarrow n$ obtenidas de las simulaciones | 103 |

ÍNDICE DE TABLAS

| | |
|--|-----|
| D.2. Tiempo medio de primer arribo de $w \rightarrow n$ obtenidas de las predicciones | 103 |
| D.3. Comparación de los resultados para el tiempo medio de primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones. | 104 |
| D.4. Porcentaje de error del tiempo medio primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$ | 104 |
| E.1. Tiempo medio de tránsito directo de $w \rightarrow n$ obtenidas de las simulaciones | 106 |
| E.2. Tiempo medio de tránsito directo de $w \rightarrow n$ obtenidas de las predicciones | 106 |
| E.3. Comparación de los resultados para el tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones. | 107 |
| E.4. Porcentaje de error del tiempo medio primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$ | 107 |
| F.1. Tiempo medio de tránsito cíclico de $w \rightarrow n$ obtenidas de las simulaciones | 109 |
| F.2. Tiempo medio de tránsito cíclico de $w \rightarrow n$ obtenidas de las predicciones | 109 |
| F.3. Comparación de los resultados para el tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones. | 110 |
| F.4. Porcentaje de error del tiempo medio primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$ | 110 |

Capítulo 1

Introducción

La difusión de partículas es un fenómeno de gran importancia en la Física, ya que tiene múltiples aplicaciones en física, biología, medicina e ingeniería. Comprender cómo se mueven las partículas al interactuar con ciertas estructuras celulares permite modelar algunos procesos fundamentales como la absorción de fármacos, el transporte de nutrientes o la señalización intracelular [Wis13, Cal13].

En términos generales, la *difusión* es el proceso mediante el cual las partículas se desplazan desde regiones donde hay mayor concentración hacia regiones donde hay menor concentración, debido a su movimiento aleatorio. Este movimiento, también llamado *movimiento browniano*, fue identificado por primera vez al observar cómo diminutas partículas suspendidas en un fluido se mueven de manera irregular debido a las colisiones con las moléculas del medio.

Cuando este proceso ocurre dentro de un espacio limitado, se dice que las partículas están en un *medio confinado*. En este tipo de sistemas, las fronteras o paredes que delimitan el espacio pueden modificar de manera significativa el comportamiento de las partículas.

El movimiento de las partículas Brownianas puede describirse mediante la ecuación de difusión explica cómo cambia la concentración de partículas en el espacio a medida que pasa el tiempo. Cuando este proceso se lleva a cabo en un medio confinado, es necesario considerar las condiciones de frontera que definen los límites del sistema. Estas condiciones permiten estudiar cómo la forma y la geometría del canal influyen en las trayectorias que siguen las partículas dentro del confinamiento, incluso poder determinar otros aspectos como: las zonas con mayor probabilidad de escape o la frecuencia de interacción con las paredes [BDB17c, BHM⁺09].

Ahora bien, cuando la geometría del medio de confinamiento es compleja, puede resultar difícil o incluso imposible obtener soluciones analíticas exactas de la

ecuación de difusión. En estos casos, las simulaciones computacionales se convierten en una herramienta valiosa para estudiar el comportamiento de las partículas y explorar distintos escenarios. Incluso cuando la geometría es más simple, las simulaciones permiten verificar los resultados teóricos y observar el movimiento de las partículas con mayor detalle, lo que contribuye a una mejor comprensión del proceso difusivo dentro de un medio confinado. De esta manera, el análisis estadístico de trayectorias individuales mediante simulaciones por computadora complementa los enfoques teóricos.

En esta investigación nos centramos en la dinámica browniana, donde no se toman en cuenta las interacciones entre partículas, ya que la idea es entender cómo se comporta una partícula al moverse dentro del confinamiento, es decir, la interacción partícula-pared. Para obtener resultados más confiables, el movimiento de una partícula se simula muchas veces, y cada simulación genera una trayectoria distinta. Al comparar y analizar todas esas trayectorias, es posible identificar ciertos patrones y tener una idea más clara de cómo ocurre el proceso de difusión.

El presente estudio se enfoca en la simulación del proceso de difusión confinada de partículas brownianas en una región bidimensional de forma cónica, con característica y condiciones de frontera bien definidas, con la finalidad de explorar cómo la forma del canal y las características de las fronteras influyen en las trayectorias difusivas.

1.1. Motivación

Las simulaciones por computadora son muy útiles para estudiar distintos tipos de problemas en la ciencia, la ingeniería e incluso en las finanzas. Gracias a ellas, se pueden recrear situaciones difíciles de observar directamente y entender mejor cómo se comportan ciertos sistemas.

Sin embargo, varios procesos naturales pueden presentar pequeñas variaciones o cambios al azar que pueden influir en los resultados. Por ejemplo, Saxton utilizó simulaciones llamadas de Monte Carlo para estudiar cómo se mueven las partículas cuando encuentran obstáculos fijos, como si se desplazaran dentro de una membrana celular [Sax93a]. Sus resultados mostraron que el tamaño de las partículas influye bastante en su capacidad de moverse.

De manera parecida, Dwyer y Bloomfield realizaron simulaciones con mezclas de ADN y proteínas [DB93]. Ellos descubrieron que la forma en que las partículas se mueven depende de la cantidad de sal presente: cuando hay poca sal, ese efecto se vuelve más notorio.

El estudio de la difusión de partículas brownianas en medios confinados y la

representación de geometrías complejas puede involucrar ecuaciones difíciles de resolver. En estos casos, las simulaciones por computadora se convierten en una herramienta fundamental, ya que permiten analizar el movimiento de partículas dentro de espacios limitados y su interacción con las fronteras del sistema.

No obstante, el procesamiento de este tipo de simulaciones puede resultar muy demandante debido a la gran cantidad de partículas involucradas como a la complejidad geométrica y características del medio confinado. Una estrategia para reducir el tiempo de ejecución consiste en el uso de la programación paralela, que permiten aprovechar al máximo la capacidad de cómputo de las infraestructuras actuales. En este contexto, desarrollar algoritmos paralelos para la simulación de la difusión de partículas en sistemas confinados resulta esencial, ya que ello reduce significativamente el tiempo de ejecución.

Sin embargo, existen diversos retos asociados a la simulación del proceso de difusión. Uno de ellos es la generación de números aleatorios, lo cual es indispensable para reproducir el proceso difusivo. Este aspecto se vuelve mucho más crítico en arquitecturas paralelas, donde es necesario garantizar independencia estadística entre hilos y mantener un desempeño adecuado. Otros desafíos incluyen la correcta detección de colisiones con paredes complejas, la gestión de memoria en arquitecturas como GPUs y el equilibrio entre precisión numérica y velocidad de cómputo.

Por otro lado, la visualización es un elemento clave en el análisis de datos, ya que los visores gráficos permiten representar la información mediante elementos visuales, facilitando la identificación de patrones, valores atípicos y tendencias. Su importancia es aún mayor en la investigación científica, donde los conjuntos de datos suelen provenir de experimentos o simulaciones. Las técnicas de visualización dependen del tipo de información: por ejemplo, los mapas permiten mostrar incidentes de tráfico en una ciudad, mientras que las gráficas de barras ayudan a identificar cuáles son los más frecuentes.

Por lo que la visualización del proceso difusivo dentro del medio de confinamiento permitirá observar su comportamiento, así como identificar patrones y zonas de mayor interacción, lo cual sería de gran ayuda para los expertos en el estudio de la difusión.

1.2. Objetivos

Diseñar e implementar un simulador paralelo del proceso de difusión de partículas brownianas en canales cónicos bidimensionales, que permita analizar la trayectorias de las partículas y los elementos fundamentales que las conforman. Asimismo, desarrollar una herramienta de visualización que muestre de manera clara

el comportamiento de las partículas dentro del canal y que represente información esencial del proceso difusivo, como el tiempo de difusión y la cantidad de interacciones partícula-pared registradas durante la simulación.

1.2.1. Objetivos Particulares

- Proponer un algoritmo parametrizado que permita simular de manera paralela la difusión de partículas en canales bidimensionales con ancho y longitud variables.
- Analizar los resultados obtenidos con el simulador y compararlos con los resultados teóricos para verificar que sean consistentes.
- Realizar el análisis estadístico de las trayectorias generadas por las partículas.
- Diseñar un visualizador parametrizable que permita visualizar datos provenientes de diferentes aplicaciones científicas.

1.3. Organización de la tesis

La presente Tesis Doctoral estructura su contenido en 8 capítulos, los cuales se resumen a continuación.

- En este primer Capítulo, se presenta el planteamiento general de la Tesis Doctoral.
- El Capítulo 2 se presentan los conceptos básicos necesarios para comprender el proceso difusivo así como el caso de estudio de este trabajo, el cual es analizar el proceso difusivo en un canal cónico, en particular en un canal cónico en 2D.
- El Capítulo 3 presenta el estado del arte de las herramientas utilizadas para simular el proceso difusivo, describiendo sus características y su modelo de programación.
- El Capítulo 4 describe el diseño e implementación del simulador propuesto, cuyo propósito es modelar el proceso de difusión de partículas en canales cónicos bidimensionales. Este simulador permite analizar las trayectorias resultantes, facilitando el estudio del comportamiento difusivo en geometrías

confinadas. También se presenta el módulo de visualización desarrollado, que complementa al simulador propuesto y permite representar de forma gráfica las trayectorias de las partículas obtenidas en el proceso de simulación. Este módulo permite una interpretación más clara del proceso difusivo en los sistemas estudiados.

- En el Capítulo 5 se presentan los principales resultados del simulador desarrollado, del análisis de las trayectorias de las partículas y de la visualización de estos datos.
- Finalmente en el Capítulo 6 se presenta las conclusiones y las sugerencias para el trabajo futuro.

Capítulo 2

Marco Conceptual

El proceso difusivo es un fenómeno físico y químico fundamental que se manifiesta en una amplia variedad de sistemas, tanto naturales como artificiales. En este capítulo se aborda el estudio de dicho proceso, desde su definición y fundamentos teóricos hasta algunas de sus aplicaciones prácticas más relevantes. Se presentarán los conceptos esenciales que describen la difusión, las leyes que la rigen, así como los factores que influyen en su comportamiento en distintos contextos [DPPG24].

2.1. Conceptos básicos del proceso de difusión

La *difusión* es el proceso físico mediante el cual las partículas de una región de alta concentración, se mueven hacia una región de baja concentración (ver Figura 2.1). Es un proceso espontáneo que busca alcanzar un equilibrio en la distribución de las partículas a lo largo del sistema.

En un sistema donde hay una alta concentración de partículas en una zona y una baja concentración en otra, las partículas tienden a desplazarse desde la zona de mayor concentración hacia la de menor concentración. Este movimiento ocurre porque las partículas chocan de manera aleatoria entre sí, y estas colisiones provocan que se dispersen.

La difusión es un proceso impulsado por el movimiento aleatorio de las partículas, conocido como *movimiento browniano*. Este se caracteriza por el desplazamiento continuo e irregular de las partículas suspendidas en un líquido o gas, así como por las constantes colisiones que ocurren entre ellas (ver Figura 2.2). Este fenómeno fue observado por primera vez por Robert Brown en 1827.

Algunos conceptos clave en el proceso difusivo son:

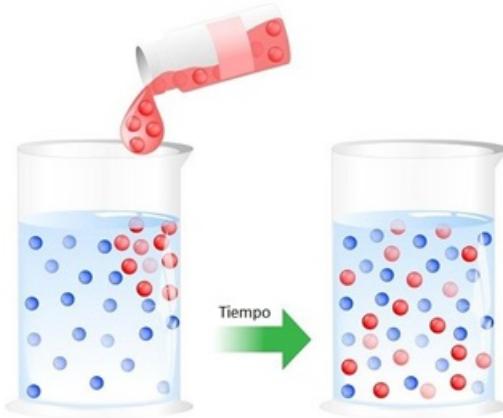


Figura 2.1: Proceso de difusión



Figura 2.2: Movimiento browniano

- **Gradiente de concentración:** Es la diferencia de concentración entre dos puntos en un sistema. Cuanto mayor sea el gradiente de concentración, mayor será el flujo difusivo.
- **Flujo difusivo:** Es la cantidad de partículas que se mueven a través de una unidad de área en un tiempo determinado debido a la difusión.
- **Coeficiente de difusión (D):** Permite cuantificar la velocidad con la que se lleva a cabo la difusión y es considerada una propiedad característica del sistema y de las partículas que se difunden.

2.1.1. Fundamentos de la difusión: las leyes de Fick

Las leyes de Fick son los principios básicos que explican cómo ocurre la difusión. Fueron propuestas por Adolf Fick y ofrecen una forma matemática de

describir este proceso. Es decir, estas leyes nos dicen cómo y por qué las partículas tienden a moverse de una zona a otra.

Las dos leyes principales son:

- *Primera ley de Fick*: nos indica que el flujo difusivo es proporcional al gradiente de concentración.

$$J(x, t) = -D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

Es decir, imaginemos que se tiene un montón de pelotitas en un lado de una caja y casi no hay pelotitas en el otro lado. Las pelotitas tenderán a desplazarse al lado donde hay pocas y van a moverse muy rápido para llenar ese espacio vacío.

- *Segunda ley de Fick*: describe cómo cambia la concentración en función del tiempo debido a la difusión. Establece que el cambio de concentración en el tiempo es proporcional a la segunda derivada espacial de la concentración.

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.2)$$

En palabras sencillas, esta ley nos dice cómo cambia la cantidad de partículas en un lugar conforme pasa el tiempo debido a la difusión. Por ejemplo, imaginemos que se deja caer una gota de tinta en un vaso con agua. Al principio, toda la tinta está concentrada en un punto, pero poco a poco se va esparciendo hasta mezclarse por completo. Esta ley describe justamente cómo va cambiando esa concentración de tinta y cómo se va distribuyendo con el tiempo.

Por lo que, esta ley nos dice que el cambio en la concentración no depende solo de cuántas partículas hay en un lugar, sino también de cómo está distribuida la concentración alrededor. Si en los puntos cercanos hay una gran diferencia de concentración, el cambio ocurrirá más rápido

2.1.2. Coeficiente de Difusión

El coeficiente de difusión (D) mide qué tan rápido se mueven las partículas mientras se dispersan en un líquido o un gas. Cuanto mayor sea este valor, más rápido se esparcen las partículas. Este coeficiente depende de factores como: *la temperatura*, ya que cuando se tiene una temperatura alta las partículas aumentan

de su velocidad; *la viscosidad del medio*, que afecta la resistencia al movimiento de las partículas; así como *el tamaño y forma de las partículas*, ya que entre más pequeñas y compactas sean las partículas, la difusión tiende a ocurrir más rápidamente.

2.2. Difusión confinada

La difusión se puede clasificar en dos categorías principales: *difusión libre* y *difusión confinada*.

La *difusión libre*, también conocida como difusión molecular, ocurre cuando las partículas se mueven sin restricciones significativas a través de un medio, como sucede en gases o líquidos homogéneos. En este tipo de difusión, las partículas siguen trayectorias aleatorias y pueden desplazarse libremente en todas direcciones.

Por otro lado, la *difusión confinada* tiene lugar cuando las partículas se mueven en un entorno que limita su desplazamiento, ya sea por barreras físicas, estructuras internas o interacciones con otros componentes del medio. Este tipo de difusión es común en sistemas biológicos, donde las partículas no tienen libertad total de movimiento. Algunos ejemplos incluyen: el movimiento de receptores dentro de la membrana celular [Sax93b, DDM⁺03], la difusión de proteínas dentro del núcleo celular [KPK01] o el paso de moléculas a través de los poros nucleares [BB02].

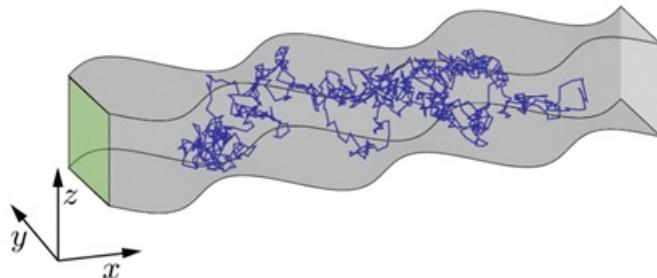


Figura 2.3: Difusión confinada

Por lo tanto, podemos definir a la **difusión confinada** como el *proceso difusivo que se lleva a cabo dentro de sistemas de tamaño limitado y fronteras definidas en el espacio euclíadiano, donde dichas fronteras pueden tener propiedades de reflexión o absorción*[DPPG24].

2.2.1. Fronteras del canal difusivo

Cuando se habla de difusión confinada, es importante considerar las fronteras o límites que restringen el movimiento de las partículas difusivas. Estas fronteras pueden ser de dos tipos: fronteras longitudinales y fronteras transversales (ver Figura 2.4). A continuación, se describe cada uno de estos conceptos:

- *Fronteras longitudinales*: Se refieren a las barreras que limitan el movimiento de las partículas en la dirección de difusión, es decir, a lo largo del eje principal del medio confinante. Estas fronteras pueden ser planas o curvas y pueden ser físicas, como una membrana o una pared sólida, o pueden ser interfaces de diferentes medios con diferentes propiedades.
- *Fronteras transversales*: Se refieren a las barreras que limitan el movimiento de las partículas en direcciones perpendiculares a la dirección de difusión. Estas fronteras pueden estar presentes en medios porosos, como poros, canales o estructuras en forma de red, que restringen el movimiento de las partículas en direcciones transversales.

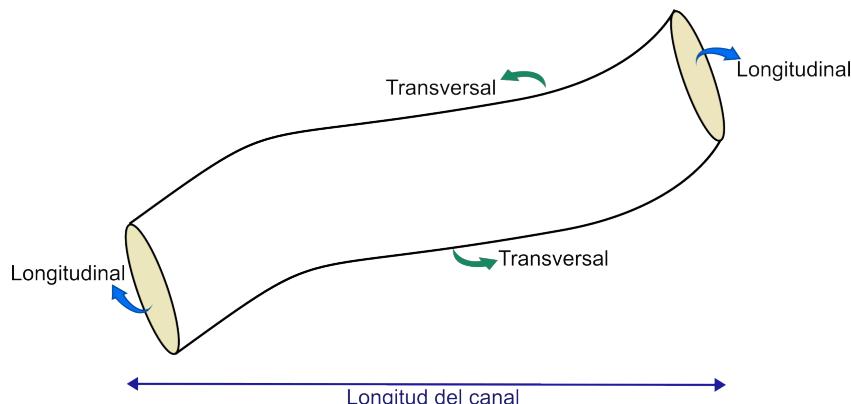


Figura 2.4: Tipos de fronteras

En conjunto, las fronteras (también llamadas paredes) longitudinales y transversales definen las restricciones espaciales en la difusión confinada. La interacción de las partículas con estas fronteras influye en la velocidad, el patrón y la eficiencia de la difusión, y es un factor importante a considerar en el estudio de la difusión en medios confinados.

2.2.2. Propiedades de las fronteras del canal difusivo

En la difusión confinada, las propiedades de las fronteras desempeñan un papel fundamental en el comportamiento del proceso difusivo. Estas propiedades

determinan cómo interactúan las partículas con los límites del sistema y, por lo tanto, pueden influir en el proceso de difusión.

Las paredes del canal pueden poseer propiedades absorbentes o reflejantes, a continuación describiremos cada una de ellas.

- **Pared o frontera absorbente:** Es un tipo de límite que detiene completamente el movimiento de una partícula cuando esta entra en contacto con él (ver Figura 2.5). En otras palabras, si una partícula browniana llega a una pared absorbente, deja de moverse y se considera que ha sido absorbida o eliminada del sistema. Como resultado, la concentración de partículas en la frontera absorbente es igual a cero en todo momento.

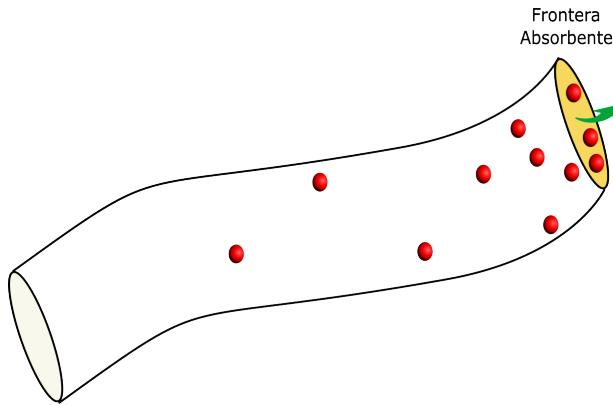


Figura 2.5: Frontera absorbente

Este tipo de frontera se utiliza para modelar situaciones en las que las partículas son capturadas o eliminadas al alcanzar ciertas regiones, como ocurre cuando una molécula es atrapada por una enzima o al atravesar un canal en la membrana celular.

- **Pared o frontera reflectante:** Es un tipo de límite que impide que una partícula salga de una región, pero no la detiene, sino que la hace rebotar. Cuando una partícula en movimiento browniano choca con una pared reflectante, no atraviesa la pared, sino que cambia de dirección y sigue moviéndose dentro del espacio confinado.

En la difusión confinada, las paredes reflectantes se usan para representar bordes que no permiten el paso de partículas, pero mantienen la energía del movimiento, como si fuera un rebote sin pérdida.

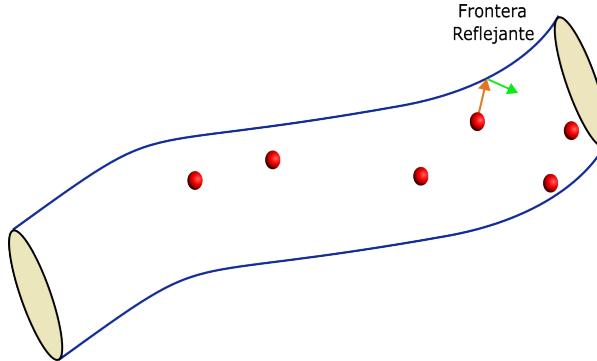


Figura 2.6: Frontera reflejante

2.2.3. Movimiento de las partículas en el canal difusivo

Para tener un mejor entendimiento del problema de difusión confinada consideremos los siguientes aspectos relevantes de las partículas y su interacción con el medio de confinamiento. Suponga que las partículas se encuentran en el origen de un sistema coordenado $x = 0$ en un tiempo t , y que posteriormente se moverán aleatoriamente, siguiendo las siguientes reglas [GCSDPV10].

1. Las partículas no tienen asociado un volumen, por lo tanto son consideradas *partículas puntuales*.
2. Cada partícula da un paso hacia la derecha o izquierda con una longitud d en un tiempo Δt . Donde d y Δt son constantes por simplicidad.

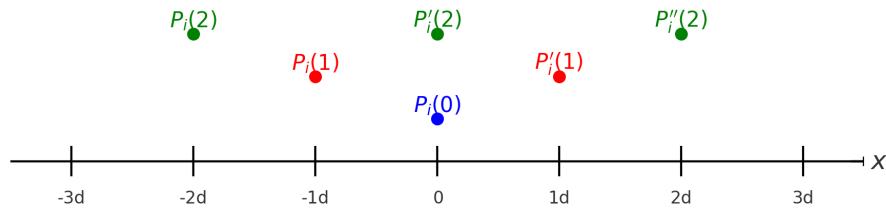


Figura 2.7: Movimiento aleatorio de una partícula en pasos de longitud d durante intervalos Δt .

Como podemos observar en la Figura 2.7, la partícula inicia en la posición $P_i(0)$ ubicada en el origen. En el siguiente instante de tiempo, puede moverse una distancia d hacia la derecha o hacia la izquierda, alcanzando así las

posiciones $P_i(1)$ o $P'_i(1)$. Posteriormente, en el segundo paso, cada una de esas posiciones vuelve a dividirse en dos posibles direcciones, generando las nuevas posiciones $P_i(2)$, $P'_i(2)$ y $P''_i(2)$.

Entonces de forma general, en cada intervalo de tiempo Δt , la partícula da un paso y cambiar su posición en una distancia d hacia la derecha o hacia la izquierda.

Cada punto $P_i(n)$ representa la posición posible de la partícula en el paso n .

Por lo tanto, la posición de la i -ésima partícula en el paso n diferirá con la posición anterior (paso $n-1$) de una distancia d y la podemos escribir como:

$$P_i(n) = P_i(n-1) \pm d \quad (2.3)$$

- 3. La probabilidad de dar pasos a la izquierda o a la derecha es equiparable. Además las partículas no guardan memoria de lo que hicieron en el paso anterior.
- 4. Las partículas no tienen interacción entre ellas, ya que cada partícula se mueve independientemente de las otras.

Ahora bien, si las partículas se mueven aleatoriamente dentro de un canal difusivo o canal de confinamiento recordemos que dicho canal se caracteriza por tener límites transversales y/o longitudinales, y que pueden tener propiedades reflejantes, o absorbentes.

Cuando una partícula alcanza una *frontera absorbente*, esta es removida del sistema. Por lo que la concentración de partículas en la frontera, ubicada en $x = f_a$, es igual a cero todo el tiempo y la ecuación que la representa es la siguiente:

$$p(f_a, t) = 0 \quad (2.4)$$

Ahora bien, si una partícula alcanza una *frontera reflejante*, ésta sufre un cambio de dirección, es decir, el flujo¹ de partículas a través de la frontera reflejante ubicada en $x = f_r$ es igual a cero, y la ecuación que lo representa es:

$$J(f_r, t) = 0 \quad (2.5)$$

¹Es la cantidad de partículas que atraviesa una sección perpendicular a la dirección de desplazamiento por unidad de tiempo.

2.2.4. Conceptos básicos de las trayectorias difusivas

Una **trayectoria difusiva** es el recorrido que sigue una partícula al desplazarse de forma aleatoria como resultado del proceso de difusión. Cuando la partícula realiza una transición entre dos extremos de un intervalo, su trayectoria puede dividirse en dos partes: **el segmento de tránsito directo y el segmento de tránsito cíclico**.

Recordemos que la partícula se desplaza dentro de un canal, por lo que algunas veces rebota contra sus paredes mientras avanza para alcanzar la salida (frontera absorbente).

Por lo que, la partícula choca varias veces con las paredes: esa parte de la trayectoria se llama *tránsito cíclico*. Pero en algún momento, la partícula deja de chocar con las paredes y va directamente hacia la salida del canal, donde finalmente queda atrapada. Ese último tramo, sin más rebotes, se llama *tránsito directo*.

En la Figura 2.8 se ilustra esta distinción, donde el **segmento de tránsito directo** se representa con una **línea discontinua de color rojo**, mientras que el **segmento cíclico** se representa con la **línea punteada de color azul**.

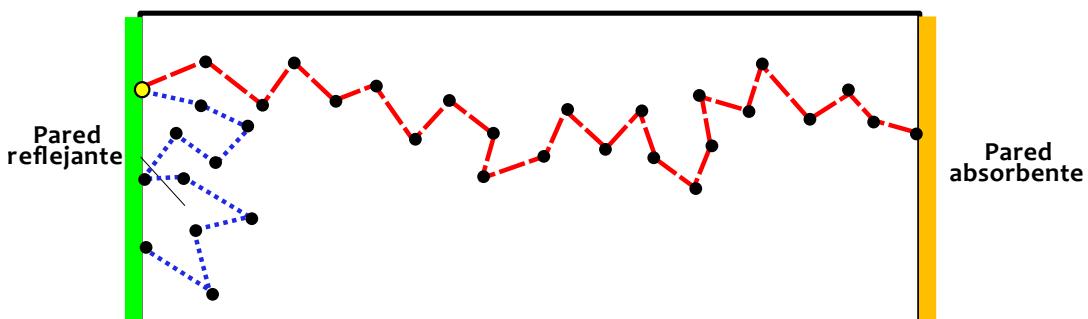


Figura 2.8: Trayectoria difusiva en un sistema confinado

A la suma de la duración de estos dos segmentos se le conoce como **tiempo de primer arribo** al cual denotaremos como τ_{fpt} . Llamaremos **tiempo de tránsito directo** a la duración asociada al tránsito directo, y **tiempo de tránsito cíclico** al correspondiente a la parte cíclica.

2.3. Difusión confinada en canales cónicos

El estudio de la difusión de partículas brownianas en medios confinados es fundamental para comprender numerosos procesos biológicos, físicos y químicos. En particular, los canales cónicos bidimensionales ofrecen un modelo idóneo para

analizar cómo el confinamiento geométrico afecta la dinámica difusiva, al restringir el movimiento libre de las partículas.

En esta sección estudiaremos la difusión de partículas dentro de canales cónicos que presentan una frontera longitudinal reflejante y otra absorbente, y así analizar el tiempo de primer arribo, el tiempo de tránsito directo y el tiempo de tránsito cíclico. A través de este análisis, se podrá determinar cómo la geometría del medio de confinamiento influye en el proceso difusivo.

2.3.1. Estudio de canales cónicos tridimensionales (Tubos)

Para canales cónicos tridimensionales(es decir, con forma de tubo), Berezhkovskii et al. [BDB17a] se desarrollaron expresiones analíticas para las distribuciones de probabilidad asociadas al tiempo de primer arribo, al tiempo de tránsito cíclico y al tiempo de tránsito directo. A partir de dichas distribuciones, los autores obtuvieron los valores promedio de estas variables, lo que permitió caracterizar con mayor detalle el comportamiento difusivo dentro del canal.

La representación esquemática de un tubo cónico tridimensional es similar al que se muestra en la Fig. 2.9. Existen dos formas posibles para este tipo de canal :

Canal en contracción, cuando el tubo se estrecha, es decir, cuando las partículas se desplazan desde la región más ancha hacia la más angosta. Este caso se denotará como $w \rightarrow n$.

Canal en expansión, cuando el tubo se ensancha, es decir, cuando las partículas se mueven desde la región más angosta hacia la más ancha. Este caso se denotará como $n \rightarrow w$.

Las expresiones teóricas para el *tiempo medio del primer paso*, también conocido como *tiempo medio de primer arribo*, en cada uno de estos dos casos fueron obtenidas por Berezhkovskii et al. [BDB17b] y se expresan como:

$$\tau_{fpt}^{n \rightarrow w} = \frac{L^2}{6D_\lambda} \left(\frac{3 + \left(\frac{\lambda L}{a}\right)}{1 + \left(\frac{\lambda L}{a}\right)} \right) \quad (2.6)$$

$$\tau_{fpt}^{w \rightarrow n} = \frac{L^2}{6D_\lambda} \left(3 + 2 \left(\frac{\lambda L}{a} \right) \right) \quad (2.7)$$

Cuando $\lambda = 0$, las Ecuaciones 2.6 y 2.7 predicen que el *tiempo medio del primer arribo* es de:

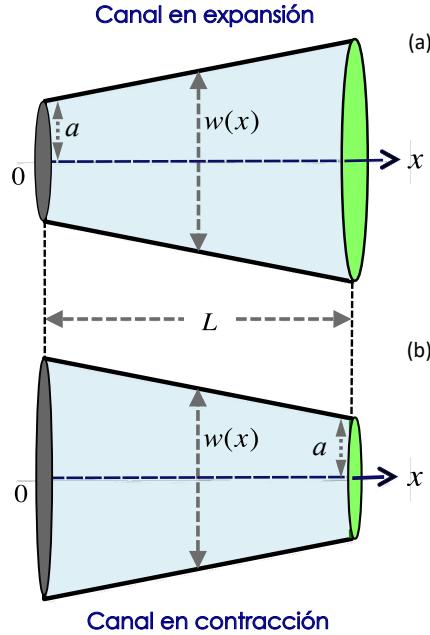


Figura 2.9: Canal cónico tridimensional

$$\tau_{fpt}^{w \rightarrow n} = \tau_{fpt}^{n \rightarrow w} = \frac{L^2}{2D_0} \quad (2.8)$$

En Reguera-Rubi[RR01] y Kalinay-Percus[KP06], propusieron la siguiente expresión para $D(x)$ para un tubo 3D.

$$D(x) = \frac{1}{\sqrt{1 + r'(x)^2}} D_0. \quad (2.9)$$

Donde:

$$\left| \frac{dr(x)}{dx} \right| = \lambda$$

En consecuencia, la Ecuación 2.9 adopta la siguiente forma:

$$D_\lambda = \frac{D_0}{\sqrt{1 + \lambda^2}}. \quad (2.10)$$

Así mismo en [BDB17c] se plantea que el *tiempo medio de tránsito cíclico* (τ_{lt})

para canales expansivos y estrechos esta dado por las siguientes ecuaciones.

$$\tau_{lt}^{n \rightarrow w} = \frac{L^2}{6D_\lambda} \left(\frac{2}{1 + \tilde{L}} \right) \quad (2.11)$$

$$\tau_{lt}^{w \rightarrow n} = \frac{L^2}{6D_\lambda} * 2 \left(1 + \tilde{L} \right). \quad (2.12)$$

Donde:

$$\tilde{L} = \frac{\lambda L}{a}$$

Si se define a $\lambda = 0$ en (2.11) y (2.12), obteniendo así en ambos casos:

$$\tau_{lt}^{n \rightarrow w} = \tau_{lt}^{w \rightarrow n} = \frac{L^2}{3D_0} \quad (2.13)$$

Ahora bien, recordemos que el tiempo medio de primer arribo corresponde a la suma del tiempo medio de tránsito cíclico y el tiempo medio de tránsito directo:

$$\tau_{fpt} = \tau_{lt} + \tau_{tpt}.$$

Despejando, se obtiene que el *tiempo medio de tránsito directo* para canales expansivos y estrechos es:

$$\tau_{tpt} = \tau_{fpt} - \tau_{lt}.$$

Al resolver esta expresión, se obtiene:

$$\tau_{tpt}^{w \rightarrow n} = \tau_{tpt}^{n \rightarrow w} = \frac{L^2}{6D_0}. \quad (2.14)$$

Las ecuaciones 2.13, 2.13 y 2.14 corresponden a un resultado bien conocido para una partícula libre que se difunde en una dimensión, como se reporta en [BDB17a]

De hecho, para un tubo, el tiempo medio de tránsito cíclico es el doble del tiempo medio de tránsito directo.

Ahora bien, al comparar el tiempo de primer arribo en canales que se expanden con respecto a aquellos que se estrechan, se puede anticipar que las partículas tardan más en escapar de un canal que se estrecha que de uno que se expande.

Para demostrar que:

$$\tau_{fpt}^{w \rightarrow n} > \tau_{fpt}^{n \rightarrow w}$$

a partir de las expresiones teóricas, y considerando $\tilde{L} = \frac{\lambda L}{a}$, con $\tilde{L} > 0$. Entonces, las expresiones para los tiempos de primer arribo se pueden reescribir como:

$$\frac{L^2}{6D_\lambda} * \frac{3 + \tilde{L}}{1 + \tilde{L}} > \frac{L^2}{6D_\lambda} * (3 + 2\tilde{L})$$

Como el factor $\frac{L^2}{6D_\lambda}$ es positivo, podemos compararlos directamente a través de sus factores internos:

$$3 + 2\tilde{L} > \frac{3 + \tilde{L}}{1 + \tilde{L}}.$$

Multiplicamos ambos lados por $1 + \tilde{L}$ (positivo para $\tilde{L} > 0$):

$$(3 + 2\tilde{L})(1 + \tilde{L}) > 3 + \tilde{L}.$$

Desarrollando el lado izquierdo:

$$\begin{aligned} (3 + 2\tilde{L})(1 + \tilde{L}) &= 3(1 + \tilde{L}) + 2\tilde{L}(1 + \tilde{L}) \\ &= 3 + 3\tilde{L} + 2\tilde{L} + 2\tilde{L}^2 \\ &= 3 + 5\tilde{L} + 2\tilde{L}^2. \end{aligned}$$

Entonces, la desigualdad se convierte en:

$$3 + 5\tilde{L} + 2\tilde{L}^2 > 3 + \tilde{L}.$$

Restando $3 + \tilde{L}$ de ambos lados:

$$(3 + 5\tilde{L} + 2\tilde{L}^2) - (3 + \tilde{L}) = 4\tilde{L} + 2\tilde{L}^2 > 0.$$

Dado que $\tilde{L} > 0$, se cumple que $4\tilde{L} + 2\tilde{L}^2 > 0$, por lo tanto:

$$\tau_{fpt}^{w \rightarrow n} > \tau_{fpt}^{n \rightarrow w}.$$

Esto demuestra que el tiempo medio de primer arribo es mayor cuando la partícula se desplaza desde la región ancha hacia la angosta del canal, es decir,

cuando el canal se estrecha.

Como podemos observar en la Figura 2.10, el tiempo medio de primer arribo y los tiempos de tránsito cíclico aumentan con L para la dirección de estrechamiento y disminuyen para la dirección opuesta.

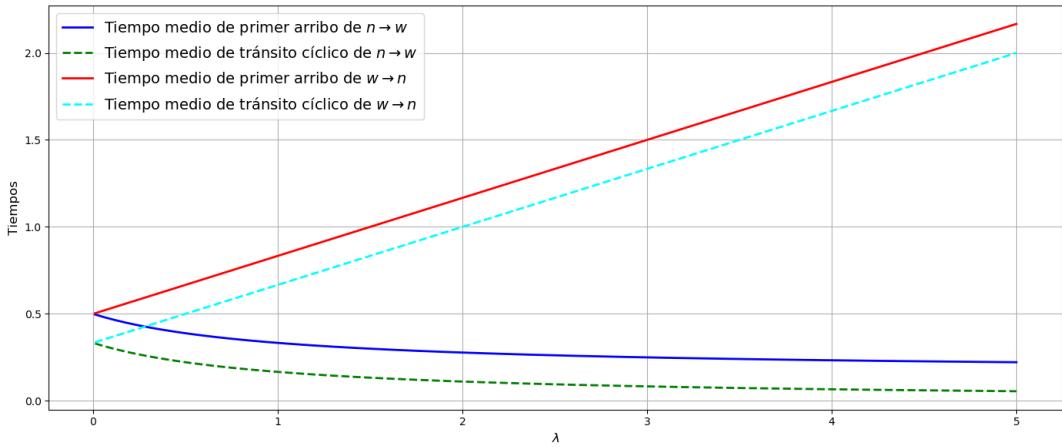


Figura 2.10: Comparación de los tiempos medios de primer arribo y de tránsito directo en función de λ

2.3.2. Estudio de canales cónicos en 2D

En la sección anterior se estudió la difusión en canales cónicos tridimensionales, lo que permitió explorar el efecto de la geometría en un sistema más general. Sin embargo, el eje central de esta tesis es el análisis de la difusión en canales cónicos bidimensionales de ancho variable $w(x)$ y longitud L , como se muestra en la Figura 2.11.

Este nuevo enfoque no solo simplifica ciertos aspectos del problema, sino que también permite profundizar en el análisis del transporte en medios confinados con geometrías variables.

En la Figura 2.11 se muestra un **canal en expansión**, así como un **canal en contracción**. En ambos casos, el canal presenta una frontera longitudinal absorbente ubicada en $x = L$ (ver línea punteada verde en la Figura 2.11), una frontera longitudinal reflejante en $x = 0$, y fronteras transversales con propiedades reflejantes.

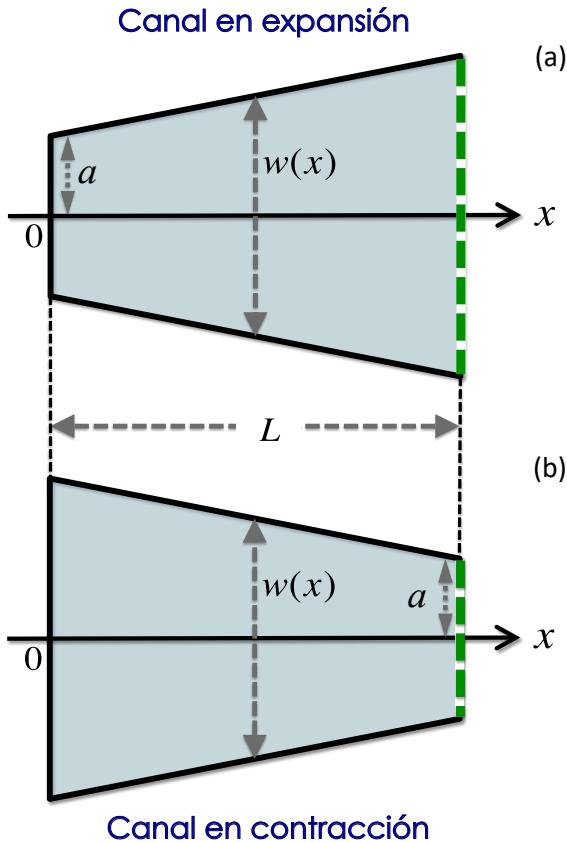


Figura 2.11: Canal cónico bidimensional

En la Figura 2.9, a representa la parte mas angosta del canal, por lo que $w(x)$ para el canal que se expande (Figura 2.11 (a)) se puede definir como:

$$w(x)_{n \rightarrow w} = 2(a + \lambda x) \quad (2.15)$$

Para el canal que se estrecha (Figura 2.11 (b)), $w(x)$ se define como:

$$w(x)_{w \rightarrow n} = 2(a + \lambda(L - x)) \quad (2.16)$$

Donde $0 \leq x \leq L$ y 2λ es la tasa de variación del ancho.

Ahora bien, la forma del canal influye en el movimiento de la partícula:

- Si el canal es ancho, la partícula tiene más espacio para moverse hacia los lados.

-
- Si el canal es estrecho, las posiciones posibles son mucho más limitadas.

Si el sistema alcanza un *equilibrio lateral*, la partícula ya no se mueve hacia los lados del canal, sino que su movimiento solo ocurre a lo largo del eje principal del canal (eje X).

En este contexto, aparece el **potencial de entropía**, el cual no es una fuerza física real (como la gravedad), sino un efecto estadístico que surge porque el ancho del canal $w(x)$, cambia con la posición de la partícula.

El potencial de entropía mide cómo la variación del ancho del canal influye en la tendencia natural de una partícula al encontrarse en ciertas posiciones y se define como:

$$\beta U_{\text{ent}}(x) = \ln \left(\frac{w(x)}{w(x_0)} \right), \quad (2.17)$$

donde:

- $\beta = \frac{1}{k_B T}$ es una constante que depende de la temperatura absoluta T y de la constante de Boltzmann k_B , la cual relaciona la energía con la temperatura en física.
- $w(x)$ es el ancho del canal en la posición x .
- x_0 es una posición de referencia en la que se define $U_{\text{ent}}(x_0) = 0$, lo que implica que en x_0 no existe un efecto adicional de entropía.

Por lo que, **si el canal es más ancho** en una zona, la partícula tiene más espacio para moverse y **es más probable que se encuentre allí**. En cambio, **si el canal se estrecha**, el espacio disponible disminuye y **la probabilidad de encontrar la partícula en esa región también baja**.

La ecuación modificada de Fick-Jacobs (FJ) derivada de Zwanzig[Zwa92], nos permite describir como se mueven las partículas en un canal bidimensional de ancho variable $w(x)$ con longitud L. Donde la concentración de partículas en el tiempo $C(x,t)$ determina la densidad de probabilidad de encontrar la partícula a la distancia x en el tiempo t .

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) w(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{C(x,t))}{w(x)} \right) \right], \quad (2.18)$$

Donde $D(x)$ es el coeficiente de difusión y se vuelve dependiente del espacio.

La Ecuación modificada de Fick-Jacobs (FJ) (2.18) para un canal bidimensional es aplicable cuando la tasa de variación del ancho no excede la unidad

[BDB15][VDBB16] , es decir; $0 < a \leq 1$, y $D(x)$ está dada por las formulas de Reguera-Rubi [RR01] (RR) o Kalinay-Percus[KP06] (KP),

$$D_{RR}^{2D}(x) = \frac{1}{(1 + w'(x)^2/4)^{1/3}} D_0, \quad (2.19)$$

y

$$D_{KP}^{2D}(x) = \frac{\arctan(w'(x)/2)}{w'(x)/2} D_0, \quad (2.20)$$

Dado que $dw(x)_{n \rightarrow w}/dx = 2\lambda$ y $dw(x)_{w \rightarrow n}/dx = -2\lambda$ al sustituir estos valores en las Ecuaciones 2.19 y 2.20, obtenemos:

$$D_{RR}^{2D}(\lambda) = \frac{1}{(1 + \lambda^2)^{1/3}} D_0, \quad (2.21)$$

y

$$D_{KP}^{2D}(\lambda) = \frac{\arctan(\lambda)}{\lambda} D_0. \quad (2.22)$$

Si se analiza el movimiento de una partícula dentro de un canal y observamos solo la parte del recorrido por ejemplo, el comprendido entre los puntos **a** y **b**, es posible calcular cuánto tarda, es decir el *tiempo promedio* que tarda una partícula en ir de un extremo al otro. Por lo que es posible calcular el tiempo medio de primer arribo y el tiempo medio de tránsito directo.

Este *tiempo promedio* no depende de la dirección en la que la partícula cruce el intervalo; es decir, será el mismo tanto si va de la parte más ancha a la más angosta ($w \rightarrow n$) como si lo hace al revés (i.e. $n \rightarrow w$), y está dado por la siguiente ecuación.

$$\begin{aligned} \bar{t}(a \rightarrow b) &= \left[\int_a^b \left(1 + \kappa_a e^{-\beta U(a)} \int_a^x \frac{e^{\beta U(y)}}{D(y)} dy \right) \left(1 + \kappa_b e^{-\beta U(b)} \int_x^b \frac{e^{\beta U(y)}}{D(y)} dy \right) e^{-\beta U(x)} dx \right] \\ &\times \left[\kappa_a e^{-\beta U(a)} + \kappa_b e^{-\beta U(b)} + \kappa_a \kappa_b e^{-\beta[U(a)+U(b)]} \times \int_a^b \frac{e^{\beta U(y)}}{D(y)} dy \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Donde: κ_a y κ_b representan las *tasas de atrapamiento* en los extremos del intervalo, mientras que \bar{t} indica un *promedio tomado sobre todas las realizaciones* de la trayectoria de la partícula.

Por lo que denotaremos a τ_{fpt}^{2D} como el *tiempo medio de primer arribo*, τ_{tpt}^{2D} como el *tiempo medio de tránsito directo*, y τ_{lt}^{2D} como el *tiempo medio de tránsito*

cíclico, dentro del canal cónico bidimensional.

Para calcular τ_{fpt}^{2D} , es necesario sustituir los parámetros $a = 0$, $b = L$, $\kappa_a = 0$ y $\kappa_b \rightarrow \infty$ en la Ecuación 2.23.

$$\begin{aligned} \bar{t}(0 \rightarrow L) &= \left[\int_0^L \left(1 + 0 \cdot e^{-\beta U(0)} \int_0^x \frac{e^{\beta U(y)}}{D(y)} dy \right) \left(1 + \kappa_b e^{-\beta U(L)} \int_x^L \frac{e^{\beta U(y)}}{D(y)} dy \right) e^{-\beta U(x)} dx \right] \\ &\times \left[0 \cdot e^{-\beta U(0)} + \kappa_b e^{-\beta U(L)} + 0 \cdot \kappa_b e^{-\beta[U(0)+U(L)]} \times \int_0^L \frac{e^{\beta U(y)}}{D(y)} dy \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Obteniendo así:

$$\tau_{\text{fpt}}^{2D} = \int_0^L \left(e^{-\beta U(x)} dx \int_x^L \frac{e^{\beta U(y)}}{D(y)} dy \right) \quad (2.25)$$

Considerando que las partículas pueden desplazarse en dos posibles sentidos, es decir, $n \rightarrow w$ y $w \rightarrow n$. Para el canal cónico 2D en expansión ($n \rightarrow w$), el potencial está dado por:

$$\beta U(x) = -\log \left[1 + \frac{\lambda x}{a} \right].$$

De esta expresión, se puede obtener directamente el exponente negativo y positivo de $\beta U(x)$ de la siguiente forma:

$$e^{-\beta U(x)} = e^{\log[1 + \frac{\lambda x}{a}]} = 1 + \frac{\lambda x}{a},$$

ya que $e^{\log(A)} = A$.

De manera análoga,

$$e^{\beta U(x)} = e^{-\log[1 + \frac{\lambda x}{a}]} = \frac{1}{1 + \frac{\lambda x}{a}},$$

usando la propiedad $e^{-\log(A)} = \frac{1}{A}$.

Sustituyendo estas relaciones en la Ec. 2.25, se obtiene finalmente:

$$\tau_{2Dfpt}^{n \rightarrow w} = \int_0^L \left[\left(1 + \frac{\lambda x}{a}\right) \int_x^L \frac{1}{\left(1 + \frac{\lambda y}{a}\right) D(y)} dy \right] dx. \quad (2.26)$$

Al realizar las integraciones, se obtiene:

$$\tau_{2Dfpt}^{n \rightarrow w} = \frac{a^2}{D_\lambda^{2D} \lambda^2} \left[\frac{1}{4} \tilde{L}^2 + \frac{1}{2} \tilde{L} - \frac{1}{2} \ln(1 + \tilde{L}) \right], \quad \tilde{L} = \frac{\lambda L}{a}. \quad (2.27)$$

Finalmente, factorizando $\frac{1}{4}$ y reordenando, obtenemos:

$$\tau_{2Dfpt}^{n \rightarrow w} = \frac{a^2}{4 D_\lambda^{2D} \lambda^2} \left[\tilde{L}(2 + \tilde{L}) - 2 \ln(1 + \tilde{L}) \right], \quad \tilde{L} = \frac{\lambda L}{a}. \quad (2.28)$$

Donde D_λ^{2D} debe ser sustituido por la Ecuación 2.19 o la Ecuación 2.20

Por otro lado, para el canal cónico 2D en contracción ($w \rightarrow n$), el potencial está dado por:

$$\beta U(x) = -\log \left[1 - \frac{\lambda x}{a + \lambda L} \right],$$

del cual podemos obtener las formas exponenciales positiva y negativa de la siguiente manera.

Para el exponente positivo:

$$e^{\beta U(x)} = e^{-\log[1 - \frac{\lambda x}{a + \lambda L}]}$$

obteniendo así:

$$e^{\beta U(x)} = \frac{1}{1 - \frac{\lambda x}{a + \lambda L}} = \frac{a + \lambda L}{a + \lambda L - \lambda x}.$$

Para el exponente negativo:

$$e^{-\beta U(x)} = e^{+\log[1 - \frac{\lambda x}{a + \lambda L}]}$$

Resultando:

$$e^{-\beta U(x)} = 1 - \frac{\lambda x}{a + \lambda L} = \frac{a + \lambda L - \lambda x}{a + \lambda L}.$$

Sustituyendo directamente en la Ecuación 2.25:

$$\tau_{2Dfpt}^{w \rightarrow n} = \int_0^L \left[\left(\frac{a + \lambda L - \lambda x}{a + \lambda L} \right) \int_x^L \left(\frac{a + \lambda L}{a + \lambda L - \lambda y} \right) \frac{1}{D(y)} dy \right] dx \quad (2.29)$$

Al realizar las integraciones, se obtiene:

$$\tau_{2D,fpt}^{w \rightarrow n} = \frac{a^2}{4 D_\lambda^{2D} \lambda^2} \left[2(1 + \tilde{L})^2 \ln(1 + \tilde{L}) - \tilde{L}(2 + \tilde{L}) \right], \quad \tilde{L} = \frac{\lambda L}{a}. \quad (2.30)$$

Cuando $\lambda = 0$, las Ecuación 2.28 y 2.30 se reduce, obteniendo que el tiempo medio de primer paso es:

$$\tau = \frac{L^2}{2D_0},$$

como era de esperarse para una partícula que se difunde en el eje principal.

La Ecuación 2.23 proporciona el tiempo de tránsito en el caso límite en el que κ_a y $\kappa_b \rightarrow \infty$, al resolverla obtenemos la Ecuación 2.31, la cual se presenta en [BPB03].

$$\tilde{\tau}_{fpt}(a \rightarrow b) = \tilde{\tau}_{fpt}(b \rightarrow a) = \int_a^b \left(e^{\beta U(y)} \frac{dy}{D(y)} \right) \left(\int_a^y e^{\beta U(z)} \frac{dz}{D(z)} \right) e^{-\beta U(x)} dx. \quad (2.31)$$

El tiempo medio de tránsito tiene el mismo valor independientemente de la dirección en la que ocurre la transición (es decir, es el mismo para $a \rightarrow b$ que para $b \rightarrow a$). Esto se debe a que la expresión de $\tilde{\tau}_{fpt}$ depende únicamente del potencial efectivo y de la difusividad a lo largo del canal, y no del sentido en el que se recorre el intervalo.

Si ahora sustituimos en la Ecuación (2.31) los valores explícitos del potencial en los extremos del canal, $U(0)$ y $U(L)$, y realizamos las integraciones correspondientes, se obtiene:

$$\tau_{2Dtpt} = \frac{a^2}{4D_0\lambda^2} \frac{(2 + 2L + L^2) \ln(1 + L) - L(2 + L)}{\ln(1 + L)}. \quad (2.32)$$

Cuando $\lambda = 0$, se obteniendo que el tiempo medio de tránsito directo es:

$$\tau_{2Dtpt} = \frac{L^2}{6D_0},$$

Considerando que el tiempo medio de primer arribo corresponde a la suma del tiempo medio de tránsito cíclico y el tiempo medio de tránsito directo, por lo que usando las Ecuaciones 2.28, 2.30 y 2.32 podemos obtener las expresiones para calcular el tiempo medio de tránsito cíclico.

$$\tau_{2Dlt}^{n \rightarrow w} = \frac{h^2}{4D_\lambda^{2D}\lambda^2} \frac{2\ln(1 + \tilde{L}) - \tilde{L}(2 + \tilde{L}) - 2\ln(1 + \tilde{L})}{\ln(1 + \tilde{L})} \quad \tilde{L} = \frac{\lambda L}{a} \quad (2.33)$$

$$\tau_{2Dlt}^{w \rightarrow n} = \frac{h^2}{4D_\lambda^{2D}\lambda^2} \left[\tilde{L}(2 + \tilde{L}) - 2(1 + \tilde{L})^2(1 + \ln(1 + \tilde{L})) \right] \quad \tilde{L} = \frac{\lambda L}{a} \quad (2.34)$$

Al fijar $\lambda = 0$ en las Ecuaciones 2.33 y 2.34, éstas se reducen a:

$$\tau_{2Dtpt} = \frac{L^2}{3D_0},$$

Con esto concluimos el capítulo, en el que se establecieron las ecuaciones necesarias para calcular de manera analítica los tiempos característicos del proceso difusivo en canales cónicos. Estos resultados servirán como base para contrastar y validar los datos obtenidos mediante simulaciones computacionales. En el siguiente capítulo hablaremos sobre la importancia que tienen las simulaciones en distintas disciplinas, ya que permiten recrear escenarios complejos mediante modelos computacionales, algo que se vuelve esencial cuando los fenómenos son difíciles de estudiar directamente.

Capítulo 3

Estado del Arte

3.1. Simulaciones computacionales

Las simulaciones computacionales son una herramienta indispensable en diferentes disciplinas para el estudio y análisis de fenómenos complejos. En el campo de la física y la química, las simulaciones computacionales han permitido investigar el comportamiento de sistemas a nivel atómico y molecular, obteniendo así información que permite comprender propiedades y fenómenos de interés. Para ello, se emplean técnicas como la dinámica molecular y el método de Monte Carlo, que simulan la evolución temporal de partículas y sus interacciones.

En biología, las simulaciones por computadora permiten explorar procesos y fenómenos biológicos a nivel microscópico, proporcionando información detallada sobre la estructura y dinámica de biomoléculas y sistemas biológicos en general.

En ingeniería y ciencia de materiales, las simulaciones computacionales son una herramienta clave porque nos permiten predecir y mejorar las propiedades y el comportamiento de distintos materiales. Por ejemplo, mediante simulaciones de mecánica de fluidos podemos estudiar fenómenos tan diversos como el flujo de aire alrededor de un automóvil y la circulación del agua dentro de una tubería. También están las simulaciones de elementos finitos, que sirven para analizar cómo responden las estructuras y los materiales ante diferentes fuerzas. Gracias a ellas es posible evaluar, por ejemplo, la resistencia y deformación de un puente, o entender cómo se distribuye la tensión dentro de una pieza.

En el ámbito financiero, las simulaciones computacionales son utilizadas para modelar y predecir el comportamiento de los mercados financieros, evaluar los riesgos para así tomar decisiones informadas. Estas simulaciones consideran factores como la volatilidad de los mercados, los cambios en los precios de los

activos (acciones) así como las relaciones y actividades que realizan las personas, empresas y el gobierno, proporcionando herramientas valiosas para la toma de decisiones financieras.

Por otro lado, la computación paralela ha sido fundamental en la aceleración de todo tipo de las simulaciones computacionales, permitiendo reducir significativamente los tiempos de cálculo. La programación paralela a nivel de procesador, utilizando bibliotecas como OpenMP y MPI, distribuye la carga de trabajo entre múltiples núcleos de procesador, aprovechando así la capacidad de cómputo de las máquinas actuales. Además, el uso de clústeres de computadoras y sistemas distribuidos permite aprovechar la capacidad de cómputo de múltiples nodos interconectados, lo que resulta en una mayor escalabilidad y eficiencia en las simulaciones.

Las GPU han revolucionado la aceleración de las simulaciones, ya que están especialmente diseñadas para tareas intensivas en cómputo. Al aprovechar la arquitectura paralela de las GPU, es posible acelerar significativamente el tiempo de cálculo de las simulaciones. Las bibliotecas y frameworks como CUDA y OpenCL proporcionan herramientas y lenguajes de programación que permiten aprovechar la potencia de cómputo masivo de las GPU en la simulación de procesos difusivos confinados y otras aplicaciones científicas y tecnológicas.

Además de la computación paralela a nivel de hardware, se han desarrollado algoritmos paralelos eficientes que aprovechan las características específicas de las simulaciones. Estos algoritmos se basan en técnicas como la descomposición de dominio, la descomposición de datos y la paralelización de bucles, entre otros, optimizando el rendimiento y la eficiencia de las simulaciones.

En resumen, las simulaciones computacionales desempeñan un papel fundamental en diversas disciplinas científicas y tecnológicas. La simulación paralela, junto con el uso de técnicas avanzadas y la utilización de hardware especializado como las GPU, permite abordar sistemas más grandes y complejos, acelerando los tiempos de cálculo y proporcionando resultados precisos y significativos para la comprensión y optimización de fenómenos y procesos.

3.2. Simulación del proceso difusivo confinado

La **simulación del proceso difusivo confinado** consiste en modelar el movimiento de partículas dentro de geometrías restringidas. Estos sistemas presentan retos particulares debido a la interacción de las partículas con las fronteras del canal y a las posibles interacciones entre las propias partículas. Para reducir el tiempo de cálculo para obtener resultados, se puede hacer uso de la simulación paralela.

Una de las técnicas más empleadas en la simulación paralela de procesos difusivos confinados es la **dinámica molecular** paralela (PMD). Esta técnica simula el movimiento e interacción de partículas a nivel atómico o molecular. En la simulación paralela, el sistema se divide en múltiples subregiones, las cuales se asignan a distintos procesadores o núcleos de CPU para simular simultáneamente diferentes partes del sistema. Así, se logra acelerar considerablemente el tiempo de cálculo y se pueden abordar sistemas de mayor tamaño y complejidad.

Otra técnica común en este ámbito es la **simulación paralela de elementos finitos (PFEM)**. La simulación de elementos finitos se utiliza para resolver ecuaciones diferenciales parciales y modelar el comportamiento de materiales y estructuras. En su versión paralela, la malla de elementos finitos se segmenta en subdominios que se asignan a diversos procesadores/núcleos de procesamiento para efectuar los cálculos de forma simultánea. Esta estrategia permite reducir el tiempo de simulación y manejar problemas de mayor escala y complejidad en procesos difusivos confinados.

De igual forma, la **dinámica browniana** es una técnica que permite modelar el movimiento de las partícula, el cual es un movimiento aleatorio, considerando tanto las fuerzas que actúan sobre las partículas como los impulsos aleatorios que reciben del medio. Para acelerar estos cálculos, especialmente al simular miles o millones de partículas, la dinámica browniana puede implementarse en sistemas paralelos. Esto se logra distribuyendo las partículas entre múltiples núcleos de procesamiento, dado que sus trayectorias son independientes entre sí. Así, cada procesador calcula simultáneamente la evolución de un conjunto de partículas, lo que reduce significativamente el tiempo total de simulación.

3.3. Niveles de modelado en la simulación del proceso difusivo confinado

El modelado de partículas y sus interacciones puede tener diferentes niveles de detalle, según el área de aplicación. Existen cuatro niveles que permiten modelar las posiciones de las partículas en un espacio continuo y las reacciones entre ellas. Estos niveles se describen a continuación:

- **Difusión libre:** Este nivel de detalle es el más básico y consiste en que las partículas se muevan libremente, sin restricciones, de acuerdo con el movimiento browniano.
- **Difusión confinada:** En este nivel, se considera que el proceso difusivo ocurre en geometrías como planos 2D (como membranas) o a lo largo

de canales (1D), además de espacios libres (3D). Los movimientos de las partículas están limitados por la geometría, por lo que se deben establecer las reacciones entre las partículas y la geometría.

- **Difusión con volumen excluido:** En este nivel, se considera que las partículas son objetos volumétricos que no pueden superponerse, generando así "volumen excluido". La consideración de esta característica tiene un impacto significativo en la movilidad de las partículas y las reacciones que pueden ocurrir.
- **Potenciales partícula-partícula:** En este nivel de detalle, además del desplazamiento y el volumen excluido, se tienen en cuenta las fuerzas atractivas entre las partículas. Esto permite la formación de agrupaciones de partículas y modelar geometrías complejas, siendo este el enfoque utilizado en simulaciones de Dinámica Molecular.

En la siguiente sección, presentaremos algunas herramientas utilizadas para la simulación de la difusión de partículas brownianas, así como algunas de sus características.

3.4. Herramientas para la simulación de la difusión de partículas brownianas.

A continuación presentaremos algunas de las herramientas disponibles para simular el proceso difusivo de partículas brownianas, para poder compararlas nos centraremos en algunas de sus características más relevantes tanto del proceso difusivo como de las características de los algoritmos paralelos que implementan.

Cell++

Es un simulador escrito en C++ de código abierto bajo la licencia GNU GPLv2 [SYWP06]. Cell ++ proporciona un entorno de simulación flexible que modela partículas puntuales individuales y poblaciones más grandes de concentraciones de partículas pequeñas. Permite una visualización 3D en tiempo real lo cual permite investigar fácilmente el comportamiento del sistema y obtener conocimientos que no se obtienen fácilmente a través de salidas numéricas. Sin embargo Cell++ solo permite simular la difusión en un solo tipo de geometría, cubos, que pueden variar de tamaño.

ChemCell

Es un simulador escrito en C ++ de código abierto que puede ejecutarse de forma

secuencial en un solo procesador o bien de forma paralela utilizando el estándar MPI. Permite simular la reacción/difusión de partículas. En las simulaciones de difusión, la geometría de una célula (membranas, organelos, etc.) se representa como simples objetos geométricos (esferas o cajas.) o como superficies trianguladas. Sin embargo, ChemCell no tiene la capacidad de crear geometrías celulares o visualizar la salida de la simulación.

MCell

Es un simulador que soporta la difusión y reacción de partículas en solución (partículas de volumen), así como partículas en membranas (partículas de superficie) [KBK⁺08] [SVHB⁺96]. Las partículas de volumen se definen mediante un nombre especificado por el usuario y un coeficiente de difusión tridimensional, mientras que las partículas de superficie requiere del coeficiente de difusión bidimensional. Sí bien las partículas se pueden agregar a las simulaciones en una variedad de maneras sólo se pueden distribuir aleatoriamente en elipsoides o cuboides de tamaño y posición arbitrarios.

Smoldyn

Es un simulador escrito en lenguaje C++ de código abierto [And16]. Permite modelar la difusión molecular, reacciones químicas, e interacciones molécula-membrana. Representa a las moléculas como una partícula esférica individual en 1, 2 y 3 dimensiones en un espacio continuo. Para la difusión utiliza una distribución Gaussiana para representar los desplazamientos aleatorios de las moléculas, puede simular partículas a la deriva. Sin embargo, la difusión en superficies solo se puede llevar a cabo en triángulos, rectángulos, esferas, cilindros, sin la posibilidad de generar nuevas geometrías. Las partículas pueden tener interacción reflejante, absorbente, o semi-absorbente.

Las características más representativas desde el punto de vista computacional así como desde el proceso difusivo, que nos permitió comparar las herramientas son:

- **Nivel de detalle de la simulación:** De acuerdo a la sección anterior, existen diferentes formas de modelar las partículas y sus interacciones, para ello ser requiere conocer el nivel (tipo) de difusión que simulan. De acuerdo a la documentación de las herramientas, todas estas realizan una difusión a nivel 2, es decir realiza una proceso difusivo confinado. La herramienta Cell ++[SYWP06] además de un proceso difusivo confinado, permite realizar la simulación de un proceso de difusión libre.
- **Dimensiones:** Al simular el proceso difusivo confinado es importante conocer la dimensión de la geometría en el que se lleva a cabo la difusión. De acuerdo a su documentación todas las herramientas permiten simular la

difusión en geometrías en 3D, sin embargo existen dos herramientas que no solo ofrecen esta posibilidad, por ejemplo la herramienta Cell++ [SYWP06] permite realizarla en geometrías en 2D y la herramienta Smoldyn [And16] la permite realizarla en geometrías en 1D y 2D.

- **Geometrías permitidas:** Debido a que todas las herramientas permite la simulación de partículas en medios confinados, conocer el tipo de geometrías aceptadas es un aspecto de gran interés, esto con la finalidad de conocer la flexibilidad con la que cuentan los usuarios en variar el tipo de geometría. En MCell, es posible hacer la difusión en geometrías como Triángulos, elipsoides, cubos y cuboides. En ChemCell, es posible realizarla en Rectángulos, cubos, esferas y cilindros. En Cell++ y Readdy es solo posible simular la difusión en Cubos. Y Smoldyn permite usar geometrías como triángulos, rectángulos, cubos, esferas y discos. Sin embargo estas geometría ya se encuentran definidas en las herramientas sin posibilidad de agregar nuevas geometrías o variar alguna característica de estas.
- **Representación de partículas:** En base al tipo de difusión que puede simularse existen diferentes forma de representar a las partículas, ya sean puntuales donde las partículas no tienen interacción entre ellas, o bien pueden ser con volumen excluido, donde las partículas son representadas como pequeñas esferas que no pueden superponerse. Debido a que la simulación de las herramientas es principalmente en un medio confinado, las partículas son simuladas de manera puntuales donde cada partícula es independiente una de la otra.
- **Análisis de trayectorias:** Para tener una mejor entendimiento de cómo se lleva a cabo la difusión en medios confinados, es importante conocer cómo es la interacción de las partículas con los límites (paredes) del medio en el que se difunden, así mismo es relevante determinar la influencia que tiene el tipo de geometría del medio de confinamiento sobre las trayectorias de las partículas. Por lo tanto, es importante conocer si estas herramientas permiten realizar un análisis de las trayectorias que siguen las partículas, es decir conocer por ejemplo el tiempo medio de primer arribo, de tránsito directo o de tránsito cíclico de las partículas, incluso conocer en área de las paredes de canal tienen mayor interacción. Por lo que de acuerdo a su documentación, ninguna de las herramientas realiza un estudio detallado de las trayectorias seguidas por las partículas, sólo es posible conocer el tiempo de primer arribo.
- **Visualización del proceso difusivo** Un manera de comprender de mejor manera el proceso difusivo es mediante la visualización, sin embargo debido

a los costos de almacenamiento que esto implica, la mayoría de las herramientas antes mencionadas no cuenta con esta funcionalidad. Solo Cell++ y Smoldyn, permiten llevar a cabo a visualización al mismo tiempo que la simulación, por lo que las trayectorias no son almacenadas y por lo tanto no es posible realizar un análisis estadístico de estas.

- **Procesamiento Paralelo:** Todas las herramientas utilizan algoritmos paralelos para llevar a cabo la simulación, donde estos algoritmos pueden estar implementados con diferentes herramientas/librerías. Por ejemplo, Mcell y ChemCell realizan la tarea usando diferentes procesos utilizando MPI (Message Passage Interface), Readdy hace uso de hilos a nivel CPU utilizando librerías que permiten su creación como OpenMP y Smoldyn hace uso de hilos a nivel CPU y GPU, para ello hace uso de librerías como OpenMP y CUDA. La documentación de Cell++ no menciona este detalle de su implementación.
- **Modelo de comunicación:** Como se mencionó en la Sección 3.1, los programas paralelos utilizan un modelo de comunicación de memoria compartida o memoria distribuida. Dado que las herramientas hacen uso de algoritmos paralelos, podemos conocer el modelo de comunicación utilizado. En Cell++, su documentación no menciona este detalle de su implementación. Mcel y ChemCell utilizan un modelo de memoria distribuida, en cambio Readdy y Smoldyn utilizan un modelo de memoria compartida.

En resumen, en este capítulo se ha presentado un estudio de los herramientas que permiten simular el proceso difusivo en un medio confinado, así como los detalles del cómo modelar las partículas y sus interacciones de acuerdo a la literatura. En la Tabla 3.1 se muestra un análisis comparativo de los simuladores antes mencionados, tomando en cuenta las características antes mencionadas.

Como podemos observar todas las herramientas realizan la simulación en sistemas confinados representando a las partículas como puntos, pero solo el simulador Smoldyn lo hace en 1, 2 y 3 dimensión. Sin embargo, todas las herramientas limitan la simulación a geometrías predefinidas, sin dar posibilidad a que los usuarios puedan definir nuevas geometrías o modificar su longitud, su amplitud, o alguna de las propiedades del medio de confinamiento.

Por otro lado, la visualización solo la realizan Cell++ y Smoldyn, las cual se lleva a cabo al mismo tiempo que la simulación, sin embargo no es posible que las trayectorias sean almacenadas. Así mismo, no es posible realizar un análisis estadístico sobre las trayectorias, y calcular el tiempo promedio de primer arribo, el tiempo promedio de tránsito directo y el tiempo promedio de tránsito cíclico.

A ello se suma que el tiempo de ejecución puede incrementarse considerablemente cuando se simulan grandes cantidades de partículas o geometrías extensas.

Aunque algunas herramientas emplean paralelización, su desempeño sigue limitado por el número de núcleos del procesador. Smoldyn es la única herramienta que permite ejecutar la simulación en unidades de procesamiento gráfico (GPUs); sin embargo, aun con esta ventaja, continúa sin almacenar las trayectorias debido a las restricciones de memoria propias de estos dispositivos

Después de analizar todas estas herramientas, puede concluirse que ninguna permite estudiar en detalle la trayectoria de cada partícula, a pesar de que en dicha trayectoria se encuentra información relevante sobre el proceso difusivo. Si bien algunas herramientas permiten visualizar el movimiento, no registran información que permita responder preguntas como:

- ¿Cuál es la duración del tránsito cíclico?
- ¿Cuál es la duración de un tránsito directo?
- ¿Con qué frontera interactúan con mayor frecuencia las partículas?
- ¿En qué regiones tienden a permanecer más tiempo?
- ¿Cómo se modifica este comportamiento cuando se altera la geometría del medio confinante?

Incluso Smoldyn, a pesar de ser la herramienta más completa (1D, 2D, 3D y con opción de GPU), no permite modificar la geometría más allá de las configuraciones predefinidas, ni registra o analiza las trayectorias. Esta limitación deja un nicho de oportunidad evidente, ya que no se tiene un simulador que permita estudiar la difusión a partir del análisis detallado de las trayectorias con geometrías variables y con la capacidad de calcular la duración de cada segmento del recorrido de una partícula.

Incluso Smoldyn, a pesar de ser la herramienta más completa (1D, 2D, 3D y con opción de GPU), no permite modificar la geometría más allá de las configuraciones predefinidas, ni registra o analiza las trayectorias. Esta limitación deja un nicho de oportunidad evidente, ya que no se cuenta con un simulador que permita estudiar la difusión a partir del análisis detallado de las trayectorias con geometrías variables y con la capacidad de calcular la duración de cada segmento del recorrido de una partícula. Además, para realizar estudios con un número considerable de partículas, del orden de diez mil o más, es indispensable contar con una implementación paralela, ya que cada trayectoria puede calcularse de manera independiente. Esto permite aprovechar mejor la capacidad de la computadora, especialmente considerando que hoy en día es común contar con infraestructura paralela, y así obtener los resultados mucho más rápido. De otro modo, hacerlo todo de forma secuencial sería muy difícil y tardaría demasiado.

Por ello, la propuesta de desarrollar un simulador que permita:

-
- Distinguir entre tiempo de primer arribo, tránsito directo y tránsito cíclico.
 - Analizar la duración de cada tipo de tránsito.
 - Identificar la cantidad de interacciones con cada frontera del sistema.
 - Permitir trabajar con geometrías flexibles y definidas por el usuario.

es una necesidad clara y muy conocida en el área.

Este simulador permitirá el análisis de las trayectorías difusivas, permitiendo variar la geometría para así tener una mejor comprensión del comportamiento de las partículas en medios confinados. No obstante, para esta primera etapa de desarrollo resulta necesario acotar el alcance del estudio a un caso representativo que permita validar la propuesta de manera controlada.

Por ello, se decidió enfocar el análisis en canales cónicos bidimensionales, una geometría que permite evaluar de manera controlada los efectos del confinamiento y explorar variaciones en parámetros como la longitud y la amplitud del canal. Esta elección ofrece facilita la validación del modelo y es lo bastante flexible para estudiar cómo los cambios geométricos afectan las trayectorias, los tiempos característicos y la interacción con las fronteras

Este enfoque inicial no limita el alcance futuro del simulador; por el contrario, sienta las bases para extender su funcionamiento a geometrías más complejas.

Adicionalmente, resulta necesario contar con una herramienta que permita visualizar la trayectoria seguida por la partícula al finalizar la simulación, así como generar gráficas que faciliten comparar los resultados obtenidos, tales como los tiempos medios de tránsito directo, tránsito cíclico y primer arribo, además de la cantidad de interacciones registradas en cada pared. Esta visualización es fundamental para comprender mejor el comportamiento de las partículas dentro del canal y para analizar, de manera más clara, los efectos del confinamiento en la dinámica difusiva.

| Simulador / Características | MCell | ChemCell | Cell ++ | Ready | Smoldyn |
|------------------------------|--|---|-----------------------------------|--------------------|--|
| Nivel de Detalle | Confinada | Confinada | Libre/Confinada | Confinada | Confinada |
| Dimensiones de la geometría | 2D,3D | 2D, 3D | 3D | 3D | 1D,2D, 3D |
| Geometrías permitidas | Triángulos, elipsoides, cuboides cubos | Rectángulos, cubos, esferas y cilindros | Cubos | Cubos | Triángulos, rectángulos, cubos, esferas y discos |
| Representación de partículas | puntos | puntos | puntos | puntos | puntos |
| Análisis de trayectorías | No | No | No | No | No |
| Procesamiento paralelo | MPI | MPI | No mencionada en su documentación | Hilos (CPU) | Hilos (CPU/GPU) |
| Modelo de comunicación | memoria distribuida | memoria distribuida | No mencionada en su documentación | memoria compartida | memoria compartida |
| Visualización gráfica | No | No | Si, durante la simulación | No | Si, durante la simulación |

Tabla 3.1: Comparativa de los simuladores de partículas en sistemas confinados.

Capítulo 4

Simulador DiffConf

En este capítulo se presenta DiffConf, el simulador desarrollado como parte de la propuesta de este trabajo de investigación. Este simulador permitirá analizar el movimiento de partículas en sistemas confinados y reproducir distintos escenarios y condiciones de frontera.

DiffConf es un simulador basado en el método de Dinámica Browniana, en el cual el movimiento de las partículas se considera independiente. Esto significa que cada partícula se desplaza de manera aleatoria como consecuencia de los choques con las moléculas del fluido, sin que exista interacción directa entre ellas; es decir, no se atraen, no se repelen y no modifican mutuamente sus trayectorias.

Como se discutió en el capítulo anterior, en esta etapa del trabajo se decidió enfocar el análisis en canales cónicos bidimensionales, DiffConf fue implementado de forma que permita manipular de manera directa parámetros como la longitud y la amplitud del canal. Esta geometría ofrece un equilibrio adecuado entre simplicidad y flexibilidad, ya que por un lado, facilita la validación del modelo teórico; y por otro, permite explorar de manera controlada cómo las variaciones geométricas influyen en las trayectorias de las partículas, en los tiempos característicos (primer arribo, tránsito directo y cíclico) y en la interacción con las fronteras del sistema.

En este capítulo primero describiremos el modelado del sistema y después presentaremos la arquitectura del simulador DiffConf. Con la finalidad de tener un mejor entendimiento de cómo se lleva a cabo la simulación en el simulador DiffConf.

4.1. Modelado del sistema

A continuación se describirá, cómo representamos a las partículas, su movimiento y la forma del canal donde ocurre la difusión. Después de explicar estos elementos básicos, y cada uno de sus módulos.

4.1.1. Modelación de partículas y su movimiento

Para el modelamiento de las partículas debemos considerar que las partículas se encuentran en el origen de un sistema coordenado $x = 0$ en un tiempo t , y que posteriormente se moverán aleatoriamente, siguiendo las siguientes reglas [GCSDPV10].

Para simular el desplazamiento de la partícula debemos considerar su distribución. La distribución de los desplazamientos adquiere la forma de una curva Gaussiana, es decir, una distribución Normal (ver ecuación (4.1)). Por lo que, los desplazamientos son generados dentro de un intervalo especificado, comúnmente de 0 a 1, de modo que los desplazamientos en el intervalo serán equiprobables.

$$N[\mu, \sigma] = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.1)$$

con media $\mu = 0$ y desviación estándar $\sigma = \sqrt{2Dt}$ donde Dt es la longitud del paso que tienen la partícula.

Cada partícula tiene un desplazamiento individual de una posición inicial P_0 que ocurre en un intervalo de Δt unidades de tiempo, de tal forma que *la duración total de la caminata está en función del número de desplazamientos (pasos) efectuados*, la cual se define en la Ecuación 4.2 como:

$$\langle T \rangle = n\Delta t \quad (4.2)$$

Dado que la partícula parte de una posición P_0 , la cual podemos definir en la Ecuación 4.3 como:

$$P_0 = x_0 \hat{i} + y_0 \hat{j} \quad (4.3)$$

la siguiente posición P_1 estará dada por Ecuación 4.4:

$$P_1 = P_0 + P_{random} \quad (4.4)$$

Donde P_{random} es un vector aleatorio cuyas componentes se obtienen al llamar

al generador de números aleatorios para cada componente, es decir:

$$P_{random} = N[\mu, \sigma]\hat{i} + N[\mu, \sigma]\hat{j} \quad (4.5)$$

Por lo tanto, cada desplazamiento que toma las partículas se generan a través de la Ecuación 4.6

$$P_i = P_{i-1} + P_{random^i} \quad (4.6)$$

4.1.2. Modelado de la difusión mediante caminatas aleatorias

El proceso de difusión puede derivarse matemáticamente mediante la construcción de una caminata aleatoria con muy pequeños desplazamientos en intervalos de tiempo pequeños dejando que estos se aproximen cero.

Matemáticamente *una caminata aleatoria* S_n se define como un conjunto de desplazamientos en el tiempo.:

$$S_n = \{P_0, P_1, P_2, P_3, P_4, \dots, P_t\} \quad (4.7)$$

Cada P_k se calcula de la siguiente forma:

$$P(t + \varsigma) = P(t) + \Phi(\varsigma) \quad (4.8)$$

Donde Φ es la variable aleatoria que describe la ley de probabilidad para tomar el siguiente paso y ς es la longitud entre pasos subsecuentes.

La precisión del algoritmo depende del tamaño de los intervalos entre los pasos dados por la partícula ς . Si ς es grande, la aproximación del modelo de difusión no será muy precisa, pero la simulación será rápida. Por otro lado, si ς es pequeño, la aproximación discreta del proceso concreto será precisa, pero el tiempo de simulación puede ser demasiado largo para ser de interés práctico. Un buen valor para ς debería devolver una aproximación precisa y la simulación no debería llevar demasiado tiempo.

El planteamiento del algoritmo que simula una caminata aleatoria se muestra en el Algoritmo 1.

```

1 Procedimiento generaCaminata(t,  $\varsigma$ )
2   Lista caminata;
3   Posicion pos←Inicial;
4   Inserta(caminata, pos);
5   para (i in t) hacer
6     pos= pos+calculaAleatorio( $\varsigma$ );
7     Inserta(caminata, pos);
8   fin
9 fin

```

Algoritmo 1: Caminata aleatoria.

En el proceso difusivo confinado el tiempo de simulación dependerá de las propiedades absorbentes con los que cuenta los límites transversales y longitudinales, por lo que si el límite longitudinal tiene la propiedad absorbente, lo que tenemos es una caminata aleatoria con espacio de estado $P_0, P_1, P_2, P_3, P_4, \dots, P_n$ donde P_0 es el punto de partida de la partícula, y P_n es el último desplazamiento que hizo y en el cual entró en contacto con la pared absorbente. En cada intervalo de tiempo τ , ocurre un cambio: un desplazamiento Δ . Por lo que el tiempo de simulación, dependerá del tiempo que tarden los desplazamiento en alcanzar el límite absorbente. El Algoritmo 2 modela una caminata en un canal con pared longitudinal absorbente

```

1 Procedimiento generaCaminataConfinada( $\varsigma$ )
2   Lista caminata;
3   Posicion pos←Inicial;
4   Inserta(caminata, pos);
5   mientras (! estaenAbsorbente(pos)) hacer
6     pos= pos+calculaAleatorio( $\varsigma$ );
7     Inserta(caminata, pos);
8   fin
9 fin

```

Algoritmo 2: Caminata aleatoria confinada.

4.1.3. Modelación de la interacción de las partículas con el medio de confinamiento.

Debido a las características del problema que se aborda en esta tesis, el nivel de modelado en el cual nos enfocaremos es *la difusión confinada*., ya que que las partículas se difunden a través de membranas celulares, las cuales se pueden

modelar como geometrías euclidianas.

Para una mejor comprensión del problema a estudiar supongan que tenemos un canal en el cual se encuentra lleno de un líquido estático, en el cual asumimos que no existen fuerzas externas que lo afecten. Además, se tiene una cantidad de partículas (brownianas) significativamente más grandes que las partículas del líquido, que se introducirán en un punto dentro del tubo y asumiremos que no hay interacciones partícula-partícula. Por lo que es deseable saber **¿Cómo se comportan las partículas dentro del tubo?**, para ello es necesario conocer la forma en que las partículas interactúan con el medio de confinamiento.

Así cada uno de los desplazamientos de la partícula se encuentran sujetos a las condiciones de frontera establecidas en la Sección 2.2.2 y considerando que el *canal de confinamiento* en el que se lleva a cabo la difusión posee fronteras definidas en el espacio euclidiano es posible modelar cada una de las fronteras mediante una función f , por lo tanto, es posible saber si las partículas han entrado en contacto con el canal de confinamiento.

Para determinar si una partícula ha tenido contacto con alguna frontera se realiza la verificación por cada desplazamiento que tiene la partícula, de tal manera que si P_i es la posición de la partícula en su i -ésimo paso y sea $f_j(x, y, z)$ la función que representa la j -ésima frontera del canal se dice que la partícula ha entrado en contacto con el canal de confinamiento si:

$$P_i \in f_{j(x,y,z)} \quad (4.9)$$

En caso de haber tenido contacto con la frontera, se deberá considerar la condiciones planteadas en la Sección 2.2.2:

- **Frontera absorbente:** Si la partícula ha entrado en contacto con una pared absorbente, i.e. $P_i \in f_j$ y f_j es una frontera *absorbente*, entonces la partícula k -ésima es removida del sistema, es decir, ya no se calculará la posición P_{i+1} . El Algoritmo 3 muestra la forma de validar si la partícula se encuentra en una frontera absorbente.
- **Frontera reflejante:** Si la partícula ha entrado en contacto con una pared absorbente, i.e. $P_i \in f_j$ y f_j es una frontera *reflejante*, entonces la partícula rebota en la frontera f_j . Si f_j es *frontera (límite) transversal* la partícula rebotara y formará un ángulo de 90° manteniendo su misma magnitud y dirección. Si f_j es una *frontera longitudinal*, la partícula rebotara y formará un ángulo de 180° manteniendo la misma magnitud y dirección(ver Algoritmo 4).

```

1 Procedimiento interaccionAbsorbente( Posicion x, Funcion pared)
2   | mientras (!estaAbsorbente(x, pared)) hacer
3   |   | calculaProximaPos(pos);
4   |   fin
5 fin

```

Algoritmo 3: Interacción con la frontera absorbente.

```

1 Procedimiento interaccionReflejante( Posicion x, Funcion pared)
2   | si (pertenece(x, pared)) entonces
3   |   | si esLongitudinal(pared) entonces
4   |   |   | Refleja180(pos);
5   |   | en otro caso
6   |   |   | Refleja90(pos);
7   |   fin
8   | fin
9 fin

```

Algoritmo 4: Interacción con la frontera reflejante.

El proceso de difusión termina cuando la partícula sale del canal de confinamiento, el cual tiene una longitud L , es decir cuando alcanza la **frontera absorbente**.

Tanto el cálculo de los desplazamientos como la verificación de la interacción se debe realizar por cada una de las partículas que participan en el sistema, por lo que para tener resultados confiables se debe realizar la simulación con un tamaño de población muestra lo suficientemente grande, en nuestra caso del orden de miles (10^4).

Cabe mencionar que el analizar las trayectorias de las partículas implicaría además un costo de almacenamiento extra, ya que por cada partícula que participa en el sistema se debe almacenar los diferentes pasos que realizó. Para así posteriormente realizar un análisis estadístico de las trayectorias, por ejemplo obtener el área de mayor concentración de las partículas, el área de escape de las partículas, área de la frontera en la que se tiene mayor interacción, etc.

Diseñar un algoritmo secuencial que realice la simulación de la difusión confinada de partículas implicaría un tiempo de ejecución muy alto debido a la cantidad de partículas que participan, a la geometría y tamaño del canal difusivo, por lo que uso de computación paralela permitirá un mejor rendimiento.

4.2. Arquitectura del simulador DiffConf

La arquitectura del Simulador DiffConf se muestra en la Figura 4.1. La arquitectura está compuesta de 2 módulos principales.

- Módulo controlador de la interfaz de usuario
- Módulo núcleo de la simulación de la difusión
- Módulo de análisis estadístico de trayectorias.

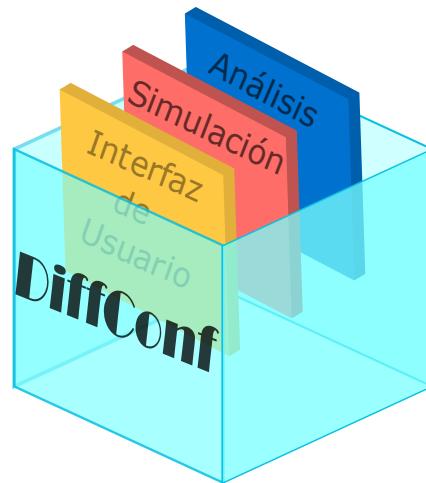


Figura 4.1: Arquitectura del simulador DiffConf

A continuación describiremos cada uno de los módulos de DiffConf que fueron implementados.

4.2.1. Módulo controlador de la interfaz de usuario

Para facilitar la interacción entre el usuario y el simulador DiffConf, se ha diseñado una interfaz web la cual es fácil de usar.

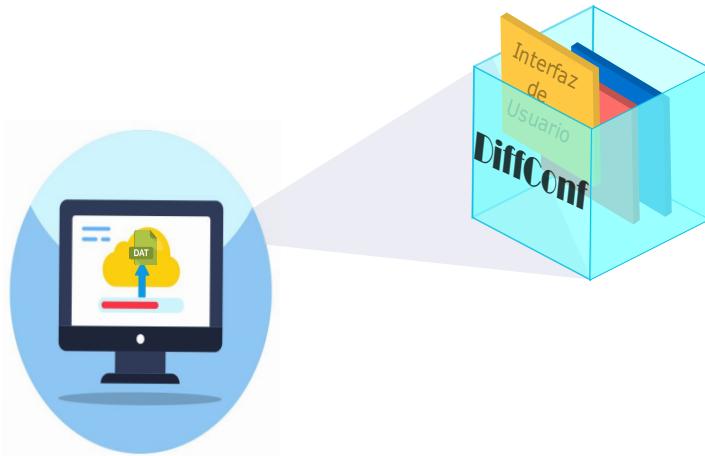


Figura 4.2: Interfaz del simulador DiffConf

```

1 NumParticles : <valor>
2 TypeChannel : <valor>
3 DirectSimulation : <valor>
4 SlopeUp : <valor>
5 InterceptUp : <valor>
6 SlopeDown : <valor>
7 InterceptDown : <valor>
8 LargeChannel : <valor>
9 TypeOrig : <valor>
10 SizeStep : <valor>
11 PosOrigen : <valor>
12 isReflecUp : <valor>
13 isReflecDown : <valor>
14 isReflecLeft : <valor>
15 isReflecRight : <valor>
16 TypeExecution : <valor>
```

Código 4.1: Estructura del archivo de entrada para canales canonicos en el simulador DiffConf

A través de esta interfaz, los usuarios pueden especificar los datos de entrada con los que quiere realizar la simulación mediante un archivo en formato ***.dat**, por lo que este módulo tiene por objetivo recibir los datos y validarlos esto con la finalidad de que el módulo núcleo los considere al momento de realizar la simulación (ver Figura 4.2).

Los **archivos en formato .dat** son archivos que contiene duplas *<etiqueta>:<valor>*. La estructura general de un archivo de entrada del simulador DiffConf

para canales cónicos bidimensionales (ver Figura 2.11) lo podemos observar en el Código 4.1.

El formato contiene las siguientes etiquetas, las cuales se describen a continuación

- **NumParticles.**- Es el número de partículas a simular dentro del canal de confinamiento.
- **TypeChannel.**- Es el identificador del tipo de canal a simular, en nuestro caso este tomará el valor de **1** para hacer referencia a los canales canónicos bidimensionales.
- **DirectSimulation.**- Este campo puede tomar tres valores. El valor **1** sí las partículas se difunden en un canal en expansión, es decir, la transición de las partículas es del extremo angosto al ancho ($n \rightarrow w$). El valor **2** sí las partículas se difunden en un canal que se estrecha, es decir, la transición de la partícula es del extremo ancho al estrecho ($w \rightarrow n$). O bien tomará el valor **3**, sí se desea realizar la simulación en ambas direcciones.
- **SlopeUp.**- Dado que se trata de un canal cónico, sus fronteras son líneas rectas por lo que este campo hace referencia a la pendiente que tendrá la frontera superior.
- **InterceptUp.**- Este campo hace referencia al valor de la abscisa que toma la ecuación de la recta que define la frontera superior.
- **SlopeDown.**- Este campo hace referencia a la pendiente que tendrá la frontera inferior.
- **InterceptDown .**- Este campo hace referencia al valor de la abscisa que toma la ecuación de la recta que define la frontera inferior.
- **LargeChannel.-.**-Hace referencia a la posición que tendrá la frontera derecha del canal y que determinará la longitud de este.
- **TypeOrig.**- Define el tipo de origen que tendrán las partículas. Tomará el valor **0**.- Si se desea que las partículas inicien la caminata en el punto **(0, 0)**. Tomará el valor **1**.-, sí las partículas inician una caminata desde una posición aleatoria en el canal, es decir, una posición (x, y) donde: x puede variar desde 0 hasta la longitud del canal, y es un número aleatorio en el rango de valores que comprenden las paredes superior e inferior. Tomará el valor **2**, sí se desea que las partículas inicien la caminata en el punto $(0, k)$, donde k , es un número aleatorio en el rango de valores comprendido por las paredes superior e inferior.

-
- ***SizeStep***.- Hace referencia exponente de la fórmula que define la longitud de los pasos que darán las partículas, esta fórmula es 10^{-b} .
 - ***PosOrigen***.- Determina la posición en la que se encuentra la recta que define la frontera izquierda del canal, que por default debe ser 0.
 - ***isReflecUp***.- Dado que las paredes del canal de confinamiento pueden tener propiedades absorbentes o reflejantes, este campo determina si la pared superior tiene la propiedad de ser una pared reflejante o no. Por lo que puede tomar el valor **1** si lo es, o bien el valor **2** si no es una pared reflejante, y por lo tanto se trata de una pared absorbente.
 - ***isReflecDown***.- Es campo determina si la pared inferior tiene la propiedad de ser una pared reflejante o no. Por lo que puede tomar el valor **0** si no lo es, ó el valor **1** sí lo es.
 - ***isReflecLeft***.- Es campo determina si la pared izquierda tiene la propiedad de ser una pared reflejante o no. Por lo que puede tomar el valor **0** si no lo es, ó el valor **1** sí lo es.
 - ***isReflecRight***.- Es campo determina si la pared derecha tiene la propiedad de ser una pared reflejante o no. Por lo que puede tomar el valor **0** si no lo es, ó el valor **1** sí lo es.
 - ***TypeExecution***.- Es campo determina si se desea ejecutar la simulación usando una GPU (tomará el valor 1) o usar una CPU (tomara el valor 0).

Este módulo tiene el objetivo de verificar que el archivo que contiene los datos de entrada cumpla con las etiquetas y los valores necesarios para iniciar la simulación de la difusión.

4.2.2. Módulo núcleo de la simulación de la difusión

Este módulo se encarga de realizar la simulación del proceso de difusión el cual consiste en que un conjunto de partículas independientes entre ellas que se difunden dentro de un canal y cuya única interacción de las partículas es con el canal difusivo. Así, DiffConf es un simulador cuyo diseño busca facilitar la simulación confinada en diferentes canales no solo variando de su longitud sino también forma, y propiedades de las paredes de confinamiento por lo que su implementación es mediante un algoritmo parametrizado.

El proceso de difusión consta de 3 etapas: la etapa de ***inicialización***, la etapa de la ***interacción con el medio confinado*** y la etapa de la ***difusiva***, dicho algoritmo lo podemos observar en la Figura 4.3.

- ***Etapa de inicialización:*** en esta etapa es utilizada para calcular el la posición inicial de la cual partirá la partícula.
- ***Etapa de interacción con el medio confinado:*** en esta etapa se calcula el tipo de interacción que tiene las partículas de acuerdo a las propiedades de la barrera, verificando si estas continúan en la misma dirección o bien se procede al cálculo del cambio de dirección de acuerdo a reglas establecidas para la interacción de las partículas con el medio de confinamiento, las cuales se establecieron en la Sección 4.1.3
- ***Etapa de difusión:*** en esta etapa, se genera un número normalmente distribuido es para cada dimensión espacial, para cada partícula, y combinado con el coeficiente de difusión especificado se obtiene la longitud del movimiento a lo largo de cada dimensión. La posición de cada una de las partículas es actualizada, para nuevamente proceder a calcular las interacciones con las paredes del canal.

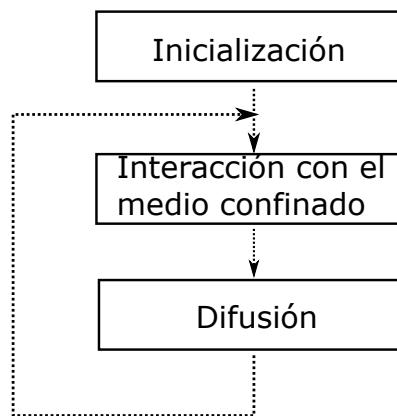


Figura 4.3: Diagrama del algoritmo que simula la difusión de una partícula en el simulador DiffConf

Dado que la Difusión de Partículas Brownianas dentro de un canal cónico de largo L, se llevaba a cabo por un conjunto de partículas independiente, este algoritmo debe ser ejecutado por cada una de las partículas, en la Figura 4.4 se puede observar la representación de Difusión confinada de todo un sistema. Sin embargo realizar este trabajo de forma secuencial puede conllevar un gran costo de procesamiento, el cual no solo depende de la cantidad de partículas que

se encuentran en el sistema, sino también al tiempo que tardan en alcanzar la condición de término del proceso difusivo.

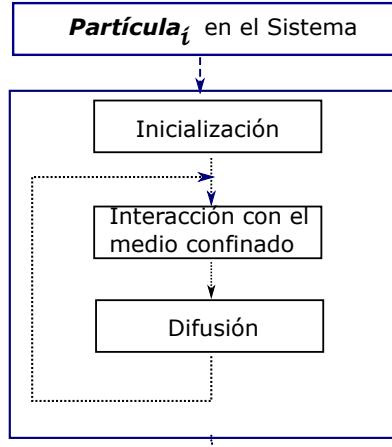


Figura 4.4: Diagrama del algoritmo que simula la difusión de varias partículas en el simulador DiffConf

Por tal motivo, DiffConf realiza la simulación del proceso difusivo de forma paralela. Sin embargo, diseñar una algoritmo paralelo no es tarea fácil, se deben considerar que no todo problema es paralelizable, por lo que es necesario determinar si el problema puede ser subdividido en pequeñas tareas (subdivisión espacial del problema) las cuales se pueden resolver de forma independiente. Para reducir el tiempo de ejecución es necesario rediseñar el algoritmo y así se debe tomar un enfoque paralelo de datos; el dominio de datos debe particionarse de modo que cada tarea acceda a un pequeño subconjunto de datos, de manera que resolver estas tareas sea lo más independiente posible. Cada tarea consta de un conjunto de instrucciones las cuales serán ejecutadas de forma simultánea en diferentes unidades de procesamiento.

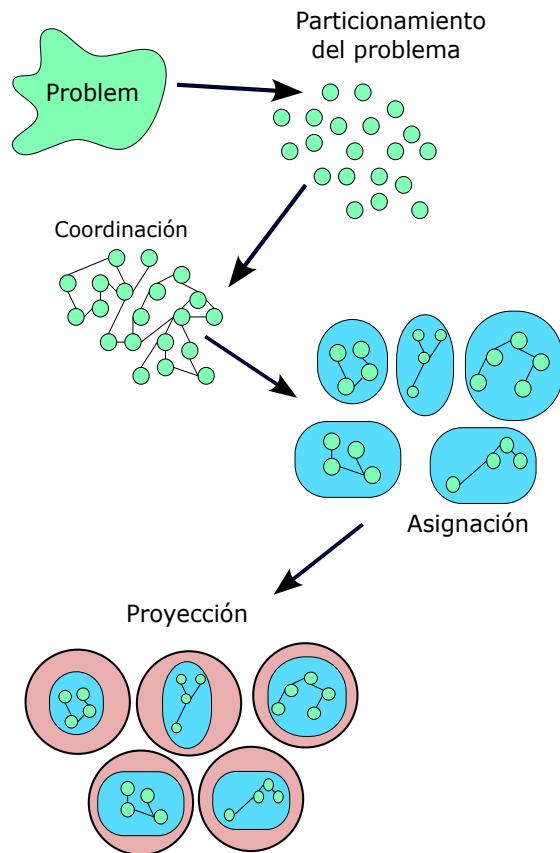


Figura 4.5: Subdivisión espacial del problema

En DiffConf, los pasos más intensivos en computación son aquellos que involucran interacciones, es decir las interacciones partícula-canal, que se tratan inmediatamente después cada paso que da una partícula (etapa de difusión). La implementación de estas interacciones consiste en probar la distancia entre cualquier partícula y las paredes del medio de confinamiento, para ver si estás han interactuado con alguna de ellas y, por lo tanto determinar si el procesos de difusión ha finalizado, es decir si todas las partículas han alcanzado una pared absorbente o bien verificar si las partículas han alcanzado una pared reflejante y así recalcular sus posiciones.

La implementación de estas interacciones consiste en comprobar la distancia entre cualquier partícula y las paredes del medio de confinamiento, para verificar si estas han interactuado con alguna de ellas y, por lo tanto, determinar si el proceso de difusión ha finalizado; es decir, si todas las partículas han alcanzado una pared absorbente, o bien comprobar si las partículas han alcanzado una pared reflejante y así recalcular sus posiciones.

Dado que las interacciones que tiene las partículas son solo con las paredes

del medio de confinamiento, y debido a que no existen interacciones partícula-partícula, cada uno de las caminatas realizadas durante por el proceso difusivo son independientes y puede representar una tarea. Así cada tarea, representa una partícula que realiza el procesos difusivo dentro del canal de confinamiento.

El conjunto de instrucciones que ejecuta cada tarea lo podemos representar en el Algoritmo 5, y que integra la modelación presentada en la sección 4.1.1.

```

1 Procedimiento Caminata( Particula p, Canal c )
2   CalculaPosInicial(p);
3   repetir
4     CalculaNuevoPaso(p);
5     si tocaParedReflejante(p, c) entonces
6       si esParedLongitudinal(p,c) entonces
7         calculaPosRefleja180(p);
8       en otro caso
9         calculaPosRefleja90(p);
10      fin
11    fin
12  hasta que (!estaAbsorben(p, posParedAbs(c)));
13 fin

```

Algoritmo 5: Simulación del proceso difusivo confinado

En el Algoritmo 5 se pueden identificar las tres etapas del proceso difusivo confinado que realizan las partículas que forman parte del sistema. En la linea 2 del Algoritmo 5, el recuadro **color azul con linea ——**, corresponde a la fase de inicialización donde a la partícula se le asigna una posición dentro del canal de difusión. Las *etapas de difusión e interacción* con el medio confinado, se encuentran relacionadas ya que cada paso nuevo que da la partícula dentro del canal, debe ser validado para determinar si se tiene interacción con alguna de las paredes del canal. La **etapa de difusión** se encuentra resaltada en el recuadro **color rosa con linea punteada**, la partícula realiza desplazamientos a partir de su posición previa. La *etapa de difusión finaliza* una vez que la partícula entra en contacto con una pared que tenga la propiedad absorbente. La **etapa de interacción** se encuentra resaltada en el recuadro de color **color amarillo con linea negra sólida**, en esta etapa cada posición que tiene la partícula es verificada para determinar si la partícula ha tenido interacción con alguna de las paredes reflejantes con las que cuenta el canal difusivo.

4.2.3. Implementación del simulador DiffConf usando paralelización multinúcleo

El simulador **DiffConf**, cuenta con una versión paralela para CPU multinúcleo, donde crean tantos hilos como núcleos de procesamiento tiene la máquina donde se realizará la simulación. Además realiza la asignación de las tareas considerando la cantidad de partículas que participan en el sistema de difusión y el número de hilos creados.

Dado que la simulación de cada partícula es completamente independiente del resto, el proceso puede paralelizarse de manera natural. En este esquema, cada hilo de ejecución se encarga de simular un subconjunto de partículas, realizando de manera independiente todos los cálculos asociados a sus trayectorias.

En la Algoritmo 6 podemos observar la forma en que se realiza el particionamiento de datos. El sistema a simular consta de un conjunto de partículas que se difunden a través de el canal difusivo. Por lo que cada tarea independiente en la que se divide el problema es la caminata realizada por un partícula. Sin embargo, considerando que pueden existir más partículas que hilos de ejecución, cada hilo realiza la simulación de un subconjunto de partículas, es decir una tarea consta de la simulación de un subconjunto de partículas. Una vez que cada tarea es finalizada almacenará su salida en el área de memoria compartida que se le asigna, de tal forma que una vez que todos los hilos han finalizados, pueda ser posible la reconstrucción de la solución general.

```
1 Procedimiento CaminataParalela( Particula p, NumParticulas
N, NumHilos H, Canal c)
2   Dividir el conjunto de partículas en H subconjuntos;
3   Inicializar un hilo de ejecución para cada subconjunto;
4   para h  $\leftarrow$  1 a H hacer in paralelo
5     // Cada hilo trabaja de forma independiente
6     para cada partícula p asignada al hilo h hacer
7       | Caminata(p,c);
8     fin
9   fin
10  Esperar a que cada hilo finalice su ejecución;
11  Combinar los resultados en un solo conjunto;
12 fin
```

Algoritmo 6: Simulación del proceso difusivo con paralelización multicore

4.2.4. Implementación del simulador DiffConf usando paralelización multinúcleo

Antes de hablar de DiffConf en su versión GPU, daremos un breve introducción en la programación sobre Unidades de Procesamiento Gráfico (GPU).

Actualmente las GPUs son promocionadas por los proveedores como una alternativa más económica y potente al hardware HPC tradicional. De hecho, la potencia de las GPU más recientes es comparable a la potencia computacional de un clúster con miles de núcleos de CPU. Sin embargo, debido a la naturaleza de las GPU, esta potencia sólo puede ser explotada por unos pocos algoritmos especializados. Los detalles de la arquitectura varían de un proveedor a otro y, a veces, incluso de un modelo a otro.

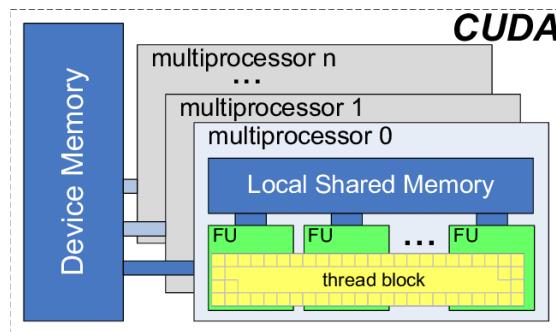


Figura 4.6: GPU CUDA

CUDA es una plataforma de programación paralela y un modelo de programación creado por NVIDIA, que permite realizar cálculos intensivos de forma más eficiente en comparación con una CPU multicore.

El modelo de ejecución de CUDA se conoce como SIMT (Single Instructions Multiple Threads) ya que considera que las GPU Nvidia constan de un conjunto de multiprocesadores (ver Figura 4.6), donde cada uno de los cuales comprenden varias unidades funcionales (FU).

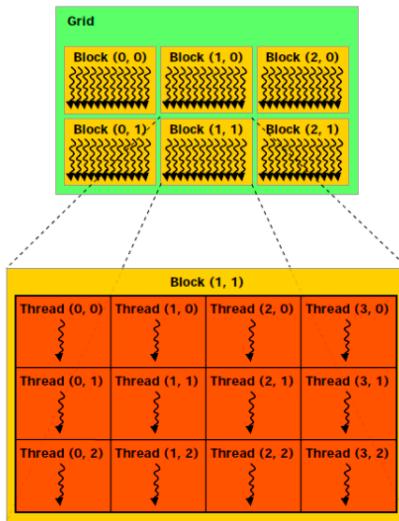


Figura 4.7: Organización jerárquica de los hilos

Los hilos de ejecución de las tarjetas Nvidia se encuentran organizados en una jerarquía de 3 niveles: ***mallas (o grids)*** compuestas por bloques de una, dos o tres dimensiones, un ***bloque (block)*** esta compuesto por un grupo de hilos de ejecución que igualmente pueden ser de una, dos o tres dimensiones. Finalmente, ***un hilo (thread)*** es la unidad básica de ejecución. La organización jerárquica de las tarjetas Nvidia la podemos observar en la Figura 4.7.

Dado que las tarjetas gráficas están instaladas en un computadora, la programación es híbrida ya que por un lado se tiene el código del programa principal que se ejecuta en la CPU (*Host*) y las llamadas a las funciones paralelas que se ejecutan en la GPU (*Device*) llamadas ***funciones de kernel***. En cada llamada al kernel se debe especificar la cantidad de hilos que ejecutarán la función kernel en la GPU.

Ahora bien, el simulador ***DiffConf*** en su versión para GPU, realiza la asignación de tareas de tal forma que una tarea es ejecutada en un hilo, por lo que cada partícula que forman parte del sistema a simular pueden iniciar su proceso difusivo dentro del canal de confinamiento de forma simultánea. En la Figura 4.8 podemos observar una representación de como sería la asignación de tareas en una GPU Nvidia.

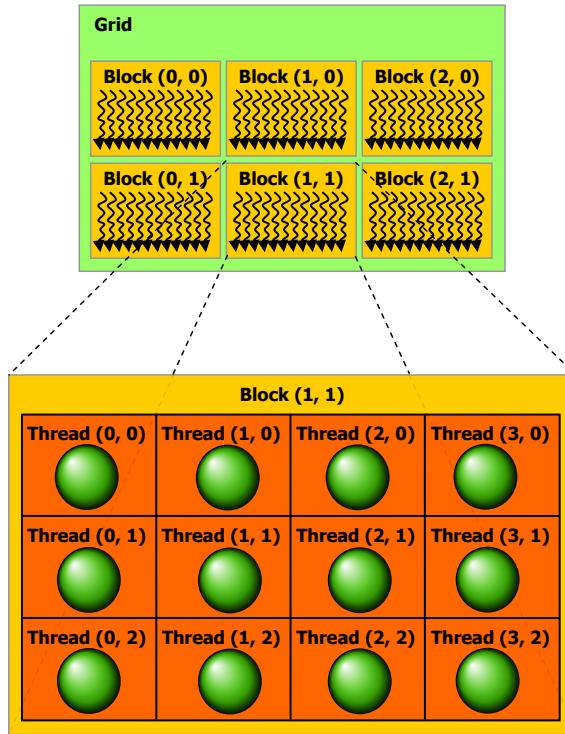


Figura 4.8: Asignación de tareas en una GPU

En la Figura 4.9 se muestra el flujo de ejecución usando CUDA. En primer lugar se copian los datos desde la memoria principal de la CPU a la memoria de la GPU (1). Luego la CPU invoca la ejecución en paralelo usando la GPU (2). La tarjeta gráfica se encarga de la ejecución en paralelo (3). Y para terminar se copian los resultados de la memoria de la GPU a la memoria principal (4). Este flujo de ejecución se ve reflejado en el Algoritmo 7.

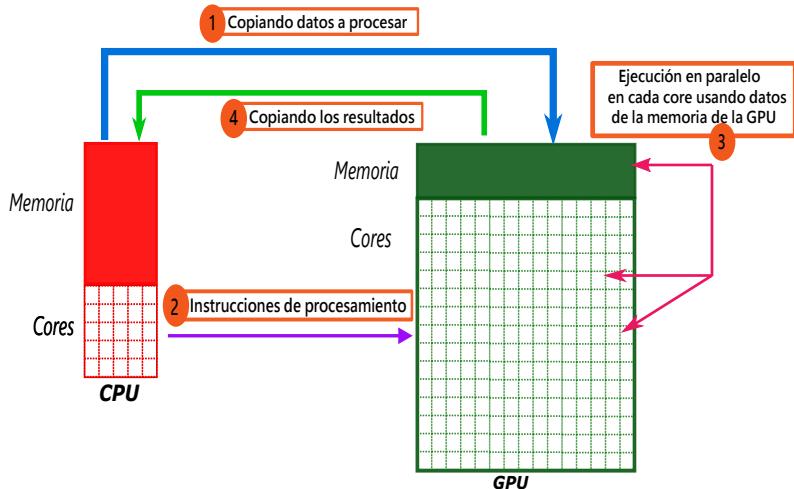


Figura 4.9: Flujo de ejecución en la GPU

```

1 Procedimiento CaminataGPU(Particula p, NumParticulas N,
Canal c)
2   // (1) Copiar datos desde la CPU a la GPU
3   CopyCPUtoGPU(p,c);
4   // (2) Invocar la ejecución paralela en GPU
5   // Lanzar un kernel con N hilos, donde cada hilo simula
6   // una partícula.
7   RunKernel(N);
8   // (3) Ejecución paralela del kernel en la GPU
9   Kernel CaminataKernel:
10  inicio
11    id ← threadId;
12    // Cada hilo trabaja de forma independiente
13    para cada partícula p asignada al hilo id hacer
14      | Caminata(p,c);
15    fin
16  fin
17  // (4) Copiar resultados desde la GPU hacia la CPU
18  CopyGPUtoCPU(resultados);
19 fin

```

Algoritmo 7: Simulación del proceso difusivo en GPU

4.3. Módulo de análisis estadístico de trayectorias.

Este modulo es encargado de realizar el calculo de los siguientes elementos:

- **Tiempo medio de primer arribo:** Tiempo promedio en que tardan las partículas en alcanzar la frontera absorbente.
- **Tiempo medio de tránsito directo:** Tiempo promedio en que tardan las partículas en tocar por última vez una pared reflejante hasta llegar a la pared absorbente. Este tiempo no solo la calcula para la pared de la que inician su trayectoria, sino para todas aquellas que tienen una propiedad reflejante.
- **Tiempo medio de tránsito cíclico:** Tiempo promedio en que tardan las partículas en llegar al segmento de tránsito directo. Este tiempo no solo la calcula para la pared de la que inician su trayectoria, sino para todas aquellas que tienen una propiedad reflejante.
- **Promedio de interacciones partícula-pared:** Promedio de veces que las partículas tienen interacción con las paredes reflejantes. Se realiza el análisis por cada una de las paredes con esta propiedad.
- **Almacenamiento de un subconjunto de trayectorias:** Considerando que para la visualización no es necesario mostrar el comportamiento de todas las partículas, resulta suficiente almacenar únicamente las trayectorias de entre 3 y 5 de ellas. Además, no es necesario registrar los millones de pasos que conforman cada caminata, ya que esto haría que la visualización fuera lenta.

Por tal motivo , consideramos registrar únicamente los eventos más relevantes de la dinámica. Para ello, se utiliza una estrategia de muestreo en la que se captura un punto de la trayectoria aproximadamente cada 1000 pasos, y se guardan de manera explícita aquellos eventos significativos, como las interacciones con las paredes del canal,los cambios marcados de dirección o el momento en que toca la barrera absorbente.

Una vez que el modulo de análisis estadístico ha terminado de calcular los elementos antes mencionados, el usuario recibirá dos tipos de retroalimentación:

- **Vía pantalla:** Donde el usuario podrá observar los valores obtenidos de los elementos anteriores excepto el subconjunto de trayectorias y la concentración de interacción.

-
- **Vía archivo:** El usuario podrá descargar un archivo que contiene toda la información de los elementos anteriores y que podrá ocupar para realizar la visualización de las trayectorias seguidas por las partículas.

Para poder comprender mejor el comportamiento de la partícula, se diseñó e implementó un módulo que permite visualizar las trayectorias seguidas por las partículas, así como los datos obtenidos de la simulación. En la siguiente sección se describen los detalles de la herramienta de visualización.

4.4. VisUAM: Una herramienta web para la visualización de datos en investigación científica

La visualización de datos tiene un rol muy importante para el análisis y la interpretación de resultados de diferentes áreas, las cuales van desde actividades de negocios (por ejemplo, datos para conocer el total de ventas en un periodo de tiempo) hasta resultados científicos producto de experimentos y/o simulaciones. La mayoría de los datos a analizar e interpretar se encuentran en formato de texto debido a su fácil almacenamiento, sin embargo, la interpretación de estos se vuelve una tarea complicada, cuando la cantidad de ellos es muy grande.

Una alternativa para realizar la interpretación de datos es el uso de visualizadores gráficos. Los visualizadores gráficos permiten desplegar los datos como elementos visuales mediante los cuales es posible inferir patrones, encontrar valores atípicos o encontrar tendencias en la observación de los datos (ver Figura 4.10). Los visualizadores tienen dos retos: Primero, el tipo de elementos a visualizar y segundo, cómo y dónde los elementos visuales serán mostrados. En cuanto al primero, es posible realizar diferentes tipos de visualizaciones (por ejemplo, gráficas estadísticas, mapas, tablas, animaciones, etc.) y con diferentes funcionalidades (por ejemplo, acercamientos, impresión, descarga o selección de los elementos a visualizar) [KBH⁺15]. Respecto al segundo reto, se tienen diferentes alternativas, una de ellas es el desarrollo de una aplicación nativa que se instale en la computadora donde se desea realizar la visualización, sin embargo, esta alternativa conlleva una serie de problemas, por ejemplo, el usuario tiene que realizar la instalación de la aplicación y sus dependencias y se puede requerir una aplicación por cada plataforma operativa. Otra alternativa es el uso de tecnologías web ya que estas presentan varias ventajas, por ejemplo, proporcionan bibliotecas o herramientas que permiten generar elementos visuales, generalmente no dependen de la plataforma operativa o el navegador web y no se requiere instalar software adicional [PSML20][WFW⁺20].

En particular, en el ámbito científico varios visualizadores han sido propuestos para la visualización de datos, por ejemplo, el visualizador web utilizado para la evaluación de pacientes de COVID-19[LFT⁺20], Mol*Viewer, un visualizador molecular[SBD⁺21], el visualizador web para el monitoreo del tránsito[KMOS17] y el visualizador de flujo vascular[OBM18]. Estos visualizadores están diseñados de acuerdo a la naturaleza de los datos (por ejemplo, existen visualizadores estadísticos, visualizadores de tráfico, visualizador molecular) o a los tipos de datos que pueden desplegar (por ejemplo, numéricos o de geo-referencia). Además, los

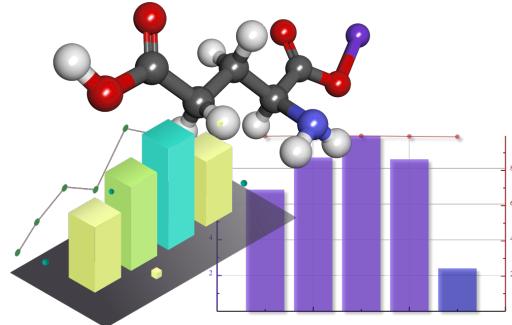


Figura 4.10: Ejemplo de elementos visuales.

usuarios pueden requerir más de un visualizador para sus datos, esto es común en la investigación científica, por ejemplo, los investigadores en dinámica molecular requieren visualizar las variaciones de propiedades fisicoquímicas en el tiempo como la energía (Gráfica en 2D) y la evolución de las interacciones entre átomos/moléculas.

Para visualizar los resultados arrojados por el simulador DiffConf, como parte del trabajo de esta tesis, se propone el desarrollo de un visualizador al que llamaremos VisUAM, el cual permite la visualización de datos sin importar su naturaleza. VisUAM está diseñado e implementado mediante tecnologías web, lo que permite que su ejecución sea simple y accesible mediante un navegador web y, por otro lado, posibilita la visualización de diversos elementos visuales. El visualizador recibe como datos de entrada un archivo con extensión **.vsm**, también llamado ***meta-formato de aplicación***, debido a que contiene resultados o datos provenientes de otras aplicaciones. Los archivos **.vsm** tienen la estructura de un archivo JSON nativo.

4.5. Descripción de VisUAM

VisUAM es una aplicación web que permite visualizar distintos tipos de datos, sin importar su naturaleza. Actualmente, VisUAM facilita la visualización de redes porosas, diagramas de Voronoi y trayectorias de partículas.

Este tipo de aplicaciones no requiere estar instalado en los dispositivos de los usuarios, ya que los datos pueden almacenarse en un servidor web y ser accesibles directamente desde un navegador.

En la Figura 4.11 podemos observar la interfaz de VisUAM, se utilizan etiquetas circulares enumeradas para su descripción. La interfaz está compuesta por una barra de información (Info bar) (1) mediante la cual podemos obtener información del visualizador. En el área de visualización (Visualization area) (2) se

desplegarán los elementos visuales. El botón de carga (Load button) (3) permite cargar los datos de entrada del archivo *.vsm. Además, se tiene un menú popup (Menu button) (4), donde sus elementos se ajustan de acuerdo al elemento que se visualiza.

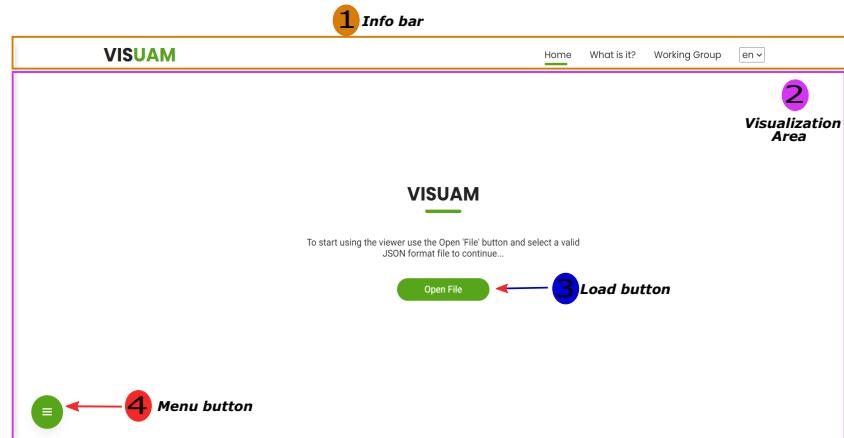


Figura 4.11: Interfaz de usuario.

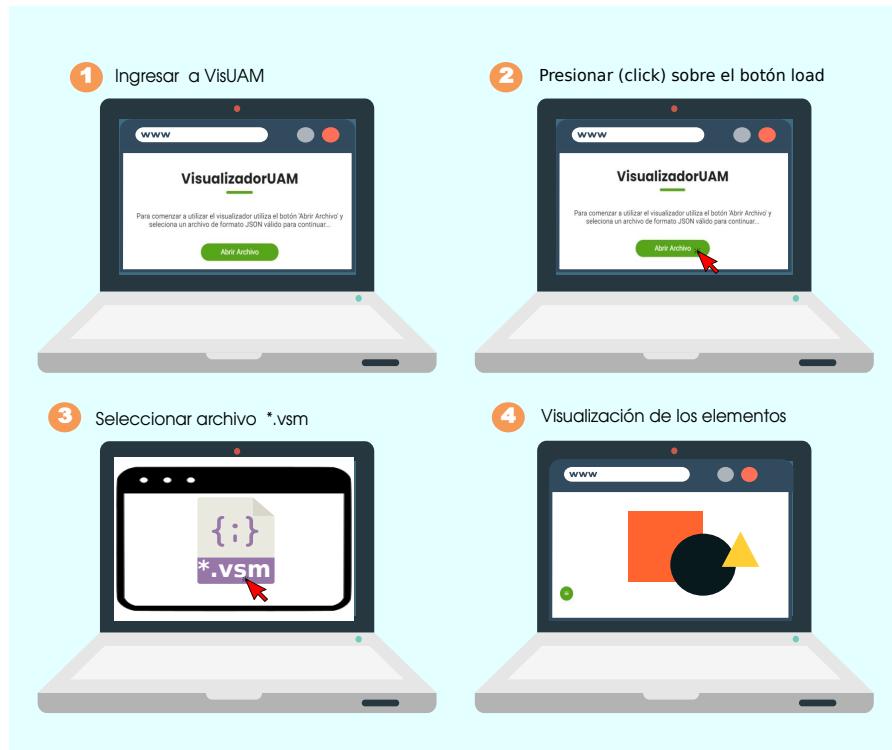


Figura 4.12: Proceso para generar una visualización

La Figura 4.12 describe el proceso para generar una visualización mediante VisUAM. Como podemos observar, el primer paso a realizar es que el usuario ejecute VisUAM en su navegador web. Posteriormente, el usuario dará click en el *botón de carga*, se abrirá una ventana en la cual podrá seleccionar el archivo *.vsm con los datos de entrada, una vez que se validan los datos del archivo, finalmente se podrán visualizar los elementos gráficos.

4.6. Formato *.vsm

Como se mencionó previamente, el archivo ***.vsm** es un archivo en formato JSON nativo que contiene los datos a visualizar. La estructura general del archivo ***.vsm** se puede observar en el Código 4.2. Éste debe tener la propiedad **name** (línea 2). Esta propiedad se refiere al tipo de visualización que se generará. El resto de las propiedades dependen de la naturaleza de los datos de visualización (por ejemplo, líneas 3-5).

```
1 {
2 "name": "DiagramType",
3 "property2": "value1",
4 "property3": "value2",
5 "property4": "value3",
6 .....
7 },
```

Código 4.2: Estructura del meta-formato de aplicación

Para la implementación de VisUAM se utilizaron diferentes tecnologías web como Bootstrap[OTc], jQuery[Fou], three.js[thr], canvasJS[can] y WebGL[web]. WebGL que es la tecnología que mejora las capacidades gráficas de los navegadores web usando HTML, JavaScript[DRM14] y OpenGL [Gro], la cual permite utilizar una tarjeta gráfica en la visualización si se cuenta con ella.

En la Figura 4.13 se muestra el diagrama de interacción y comunicación de VisUAM. Al ingresar al visualizador se lleva a cabo una petición *http* que almacena VisUAM (por ejemplo, <http://palancar.itz.uam.mx:4010/visualizador>). El servidor recibe la petición y devuelve los archivos web que integran VisUAM los cuales permiten desplegar el visualizador en el navegador.

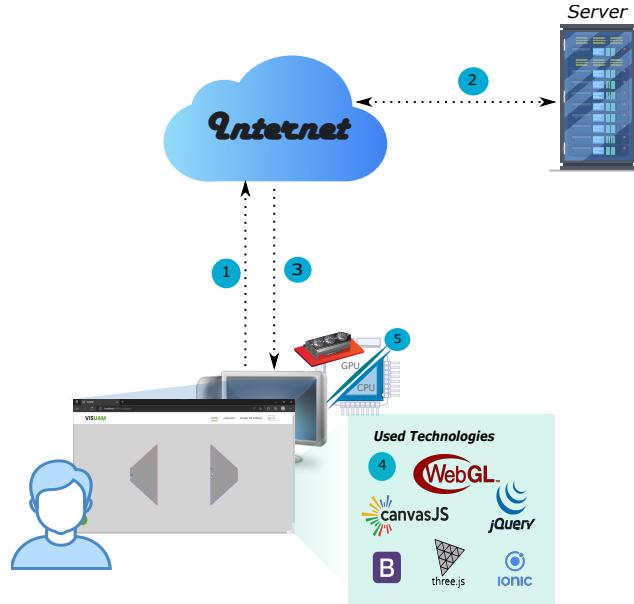


Figura 4.13: Diagrama de interacción/comunicación usuario-VisUAM.

4.7. Diseño de VisUAM

VisUAM está diseñado con la finalidad de visualizar distintos tipos de datos, los cuales pueden ser resultado de otras herramientas. Actualmente, VisUAM permite visualizar redes porosas, diagramas de Voronoi y trayectorias de partículas. Para ello, emplea un modelo de clases que consiste en una interfaz denominada **FileModelInterface** y tres clases: (i) RedPorosa, (ii) Voronoi y (iii) Particles, como se muestra en la Figura 4.14. La interfaz *FileModelInterface* proporciona un modelo genérico para cargar los datos de entrada, independientemente de la aplicación que se desee visualizar, y permite extender el visualizador para incorporar nuevos tipos de visualización. Esta interfaz define atributos y métodos abstractos que deben ser implementados por cada una de las clases encargadas de una visualización específica (RedPorosa, Voronoi y Partículas). Estos atributos y métodos son:

- **vsmFile:** Archivo de datos de entrada, el cual se lee desde el navegador.
- **canvas:** Área donde la aplicación será dibujada y renderizada.
- **draw():** Genera los elementos visuales.
- **showMenu():** Genera el menú.

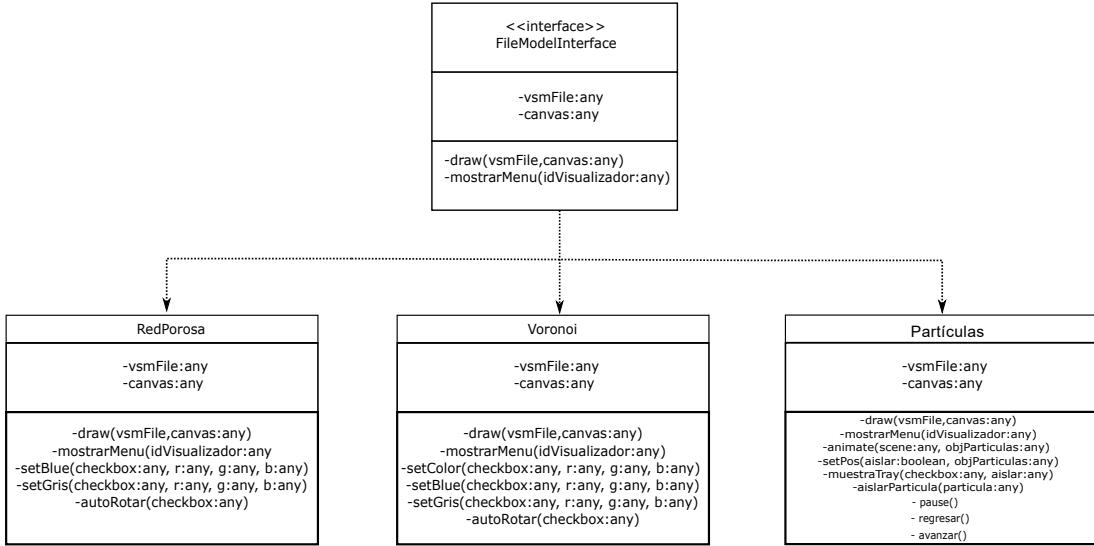


Figura 4.14: Diagrama de Clases

4.7.1. *Interfaz FileModelInterface*

La interfaz *FileModelInterface* permite generar un modelo genérico para que sean cargados los datos de entrada usando un **archivo *vsm** independientemente de la visualización a generar. El uso de esta interfaz nos permitirá generar nuevas visualizaciones en un futuro.

En la interfaz hay métodos y atributos abstractos que deben ser implementados de forma obligatoria en cada una de las clases (aplicaciones) que extiendan de la interfaz, por ejemplo, en las clases *Voronoi*, *PoreNetwork* y *Particles*, así como aquellas que se deseen ser integradas y que deben ser generadas a partir de la interfaz *FileModelInterface*.

Los atributos obligatorios que deben tener las clases son:

- **vsmFile:** Es el *meta-formato de aplicación* que se lee desde el navegador y que contiene los datos a visualizar.
- **canvas:** Espacio donde se dibujará y se hará el renderizado de los elementos visuales.

Y los métodos:

- **draw():** Es el método que genera los elementos visuales.
- **mostrarMenu():** Es el método que genera el menú de acuerdo al elemento visual que se genera.

Aunque VisUAM cuenta con la capacidad de visualizar tres tipos de elementos: red porosa, diagramas de Voronoi y trayectorias de partículas, en el contexto de esta tesis nos centraremos específicamente en la visualización de las trayectorias. Esto se debe a que dicho módulo constituye la herramienta esencial para analizar el comportamiento dinámico de las partículas dentro del canal de confinamiento, a partir de los datos generados por la simulación realizada con DiffConf. De esta manera, la visualización de trayectorias se convierte en el componente más relevante para alcanzar los objetivos planteados en este trabajo.

4.8. Visualización de Partículas: Clase Partículas

En la clase *Partículas* se definen las operaciones que permiten desplegar un modelo de animación de la difusión de partículas brownianas dentro de un sistema confinado. Esta clase contiene los métodos de la interfaz además de los métodos propios de la aplicación como:

- *animate()*: Genera una animación del comportamiento de las partículas.
- *setPos()*: Define la posición de una partícula dentro del medio confinado.
- *muestraTray()*: Muestra la trayectoria recorrida por las partículas.
- *aislaPartícula()*: Genera una nueva vista con una sola partícula la cual fue previamente seleccionada por el usuario.
- *pause()*: Pausa la animación.
- *regresar()*: Regresa un frame anterior de la animación.
- *avanzar()*: Avanza un frame de la animación.

4.8.1. Formato *.vsm para partículas

Como se ha mencionado anteriormente, para que el visualizador VisUAM pueda generar elementos gráficos, en este caso la animación de la difusión de partículas y generación de gráficas 2D, es necesario contar con los datos en el meta-formato de aplicación descrito en la Sección 4.6. En el Código 4.3 podemos observar cuál es la estructura que deben tener los datos.

```

1 { "name": "Particulas",
2   "type": "2D",
3   "NtoW": {
4     "channel": {
5       "TWall": {
6         "function": "0.8*x+0.1",
7         "isReflec": true
8       },
9       "BWall": {
10        "function": "-0.8*x-0.1",
11        "isReflec": true
12      },
13      "LBarrier": {
14        "value": 0,
15        "isReflec": true
16      },
17      "RBarrier": {
18        "value": 0.5,
19        "isReflec": false
20      }
21    },
22    "particles": {
23      "type": "punctual",
24      "total": 5,
25      "particle": [
26        {"id": 0,
27         "steps": [
28           {
29             "x": 0, "y": 0.021275}, {"x": 0.000347, "y": 0.019823},
30             ....],
31             "lastTouch": [{"x": 0.00456, "y": 0.02975}], ....]
32       },
33       "hits": [
34         {"nameBarrier": "UpperBarrier", "value": 37.74},
35         {"nameBarrier": "BottomBarrier", "value": 38.48},
36         {"nameBarrier": "LeftBarrier", "value": 23.78}
37       ],
38       "times": [
39         {"nameTime": "Tau", "value": 36.86},
40         {"nameTime": "LoopingTime", "value": 17.22},
41         {"nameTime": "TransitionTime", "value": 19.64}
42       ]
43     }
44   }
45 }
```

```

42     },
43     "WtoN": {
44         "channel": {
45             "TWall": {
46                 "function": "0.8*x+0.1",
47                 "isReflec": true
48             },
49             "BWall": {
50                 "function": "-0.8*x-0.1",
51                 "isReflec": true
52             }, .....
53     }
54 }
```

Código 4.3: Ejemplo formato Partículas

El formato `*.vsm` debe contar con las siguientes propiedades:

- ◊ **name:** Representa el tipo de visualización a generar.
- ◊ **type:** Representa la dimensión del canal en el que se difunden las partículas. En este caso 2D.

La difusión se lleva a cabo dentro de canales cónicos de ancho variable, por lo que las partículas pueden moverse desde la parte más estrecha a la más ancha del canal o viceversa. Para identificar en qué dirección se lleva a cabo la difusión utilizaremos dos etiquetas:

- ◊ **NtoW:** Difusión de lo más estrecho a lo más ancho del canal.
- ◊ **WtoN:** Difusión de lo más ancho a lo más estrecho del canal.

En cada dirección se definirán los siguientes campos:

- **channel:** El canal donde se lleva a cabo la difusión de partículas, este campo a su vez está compuesto por otros elementos.
 - **TWall y BWall.** Son las paredes superior e inferior del contenedor de las partículas.
 - **function:** Función encargada de dar la forma al canal.
 - **isReflect:** Determina si la pared del canal es reflejante o no.
 - **LBarrier y RBarrier:** Son las paredes izquierda y derecha del canal y que determinarán la longitud de este.
- **particles:** Este campo nos permite determinar las características que tendrán las partículas y se compone de los siguientes elementos:

-
- **type**: Será el tipo de la partícula.
 - **total**: Representa la cantidad de partículas que serán mostradas en la simulación.
 - **particle**: Cada partícula tiene características distintas, como se observa en el código de ejemplo, este campo está compuesto a su vez por distintos atributos. El **id** será el identificador de cada partícula, el campo **steps** representa el desplazamiento que tendrá cada partícula durante la simulación y el campo **lastTouch** que representa la última vez que la partícula toca la pared de la cual inició su desplazamiento.
- **hits**: Este campo nos permite saber la cantidad de veces que una partícula toca las paredes reflejantes, por lo que este campo consta de un arreglo, el cual contiene un conjunto de elementos cuyas etiquetas son:
 - **nameBarrier**: Nombre de la barrera reflejante.
 - **value**: Cantidad de veces que toca la partícula la pared.
 - **times**: Este campo es un arreglo que contiene los datos sobre los tiempos relacionados con la difusión de partículas, los cuales son:
 - **First-passing time**: Es el tiempo medio en que tardan las partículas en salir del canal de difusión.
 - **Transition time**: Es el tiempo medio que tardan en recorrer la parte final de la trayectoria que realizan las partículas. La parte final es aquella desde que toca la partícula por última vez la barrera de partida hasta llegar al final del canal sin volver al punto de partida.
 - **Looping time**: Es el tiempo medio que tarda antes de iniciar la parte final de la trayectoria, es decir, antes de llegar a la parte directa de la trayectoria.Los tiempos anteriores se almacenan en una dupla cuyas etiquetas son:
 - ◊ **nameTime**: El nombre del tiempo al que se hace referencia.
 - ◊ **value**: El valor que toma el tiempo.

Capítulo 5

Resultados

En este capítulo presentaremos los resultados obtenidos mediante DiffConf, así como los resultados del visualizador VisUAM. En primer lugar, mostraremos que nuestro algoritmo genera resultados correctos; para ello, se realizará una comparación con respecto a las predicciones analíticas. En segundo lugar, se presentarán las mejoras en los tiempos de ejecución logradas mediante la versión paralela del algoritmo, comparándolas con la implementación secuencial. Posteriormente, se mostrarán los resultados del análisis estadístico de las trayectorias difusivas en un canal cónico bidimensional, variando su anchura y longitud, con el propósito de determinar cómo la geometría del canal influye en la frecuencia de interacciones de las partículas con sus paredes. Finalmente, se presentan imágenes que ilustran cómo se visualizarían los resultados obtenidos en una de las simulaciones realizadas por DiffConf utilizando la herramienta VisUAM.

5.1. Evaluación de la correctitud

DiffConf es un simulador de la difusión confinada de partículas que permite el análisis de trayectorias por partes, permitiendo el cálculo de tiempo medio de primer arribo, tiempo medio de tránsito directo y el tiempo medio de tránsito cíclico, además del número de interacciones que tienen las partículas con las paredes reflejantes. Sin embargo, es necesario evaluar la exactitud de los resultados obtenidos con respecto a las predicciones analíticas.

Para tal finalidad, se realizó la simulación de la difusión de partículas en un canal bidimensional de ancho variable $w(x)$ con longitud L (ver Figura 2.9), donde sus paredes superior e inferior pueden representarse como una ecuación lineal.

Para evaluar la correctitud de los resultados obtenidos a través de DiffConf, simularemos canales con L de $[2 - 20]$ a diferentes valores de λ de $[0 - 1,2]$. La elección de los valores se basa en [BDB17d], que establece que la ecuación FJ modificada proporciona una descripción unidimensional razonablemente *precisa* de la difusión en canales bidimensionales, usando las Ecuaciones 2.21 y 2.22, cuando $\lambda \leq 0,6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$.

Para ello, se calculará la relación entre los tiempos medios obtenidos a partir de las predicciones teóricas y los tiempos resultantes de las simulaciones con DiffConf. Este cálculo permite comparar directamente ambos resultados: si la relación es cercana a uno, significa que las simulaciones reproducen adecuadamente el comportamiento esperado según la teoría.

5.1.1. Canal cónico en expansión ($n \rightarrow w$).

A continuación, se presenta la comparación entre los tiempos medios obtenidos cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$. Para ello, iniciaremos analizando el tiempo medio de primer arribo, seguido del tiempo medio de tránsito directo y, finalmente, el tiempo medio de tránsito cíclico.

5.1.1.1. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de primer arribo τ_{2Dfpt}

Con el propósito de evaluar el grado de concordancia entre los resultados teóricos y los obtenidos mediante las simulaciones con DiffConf, para ello se calcula la razón entre los valores obtenidos a partir de las predicciones analíticas y los valores generados por las simulaciones. Esta comparación permite identificar de manera directa qué tan bien reproduce DiffConf el comportamiento esperado teóricamente.

En la Tabla 5.1 presentamos una comparación del tiempo medio de primer arribo, cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$ en función de L y λ entre los resultados obtenidos por predicciones teóricas y las simulaciones de dinámica browniana. Para ello, calcularemos el cociente de los resultados de las predicciones sobre los resultados de las simulaciones.

Tabla 5.1: Comparación de los resultados para el tiempo medio de primer arribo para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Lambda | | | | | |
| 0 | 0.995836 | 0.992074 | 1.001797 | 1.000599 | 0.997811 |
| 0.2 | 1.012440 | 0.998318 | 0.992155 | 1.001469 | 1.007333 |
| 0.4 | 1.019766 | 1.007532 | 1.011372 | 1.010619 | 1.011023 |
| 0.6 | 1.032205 | 1.029458 | 1.019252 | 1.033290 | 1.025585 |
| 0.8 | 1.075413 | 1.065158 | 1.042009 | 1.051207 | 1.044633 |
| 1.0 | 1.121569 | 1.081831 | 1.093074 | 1.081116 | 1.071672 |
| 1.2 | 1.147942 | 1.140794 | 1.119332 | 1.121777 | 1.112573 |

Como podemos observar, los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicciones, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo con [BDB17d]. En la Tabla 5.2 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores; en esta se observa que el rango de porcentaje de error va desde $0.06 \leq \mathcal{E} \leq 3.30$, lo cual es posible considerar como un margen de error tolerable.

Tabla 5.2: Porcentaje de error del tiempo medio de primer arribo para la difusión de $n \rightarrow w$

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| Lambda | | | | | |
| 0 | 0.4 | 0.8 | 0.2 | 0.1 | 0.2 |
| 0.2 | 1.2 | 0.2 | 0.8 | 0.1 | 0.7 |
| 0.4 | 2.0 | 0.8 | 1.1 | 1.1 | 1.1 |
| 0.6 | 3.2 | 2.9 | 1.9 | 3.3 | 2.6 |

En el Apéndice A se pueden consultar los resultados completos tanto de las simulaciones como de las predicciones analíticas.

5.1.1.2. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito directo τ_{2Dtp}

Al igual que en el análisis del tiempo medio de primer arribo, ahora se realizará la comparación correspondiente para el tiempo medio de tránsito directo. Para ello, se calcula nuevamente la razón entre los valores obtenidos a partir de las predicciones analíticas y los resultados generados por las simulaciones con DiffConf.

En la Tabla 5.3 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito directo, cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulaciones de dinámica browniana.

Tabla 5.3: Comparación de los resultados para el tiempo de tránsito directo para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.996 | 0.998 | 0.993 | 1.004 | 0.994 |
| 0.2 | 1.010 | 0.998 | 0.996 | 1.004 | 0.999 |
| 0.4 | 1.026 | 1.012 | 1.017 | 1.008 | 1.008 |
| 0.6 | 1.053 | 1.038 | 1.025 | 1.033 | 1.024 |
| 0.8 | 1.095 | 1.075 | 1.055 | 1.053 | 1.053 |
| 1.0 | 1.151 | 1.100 | 1.109 | 1.098 | 1.081 |
| 1.2 | 1.203 | 1.164 | 1.133 | 1.137 | 1.121 |

Como podemos observar, los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicciones, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo con [BDB17d]. En la Tabla 5.4 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores; en esta se observa que el rango de porcentaje de error va desde $0.1 \leq \mathcal{E} \leq 5.3$, lo cual es posible considerar un error tolerable de acuerdo con los expertos en el área.

Tabla 5.4: Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $n \rightarrow w$

| Lambda | Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|---------------|-----------------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|
| 0 | | 0.4 | 0.2 | 0.7 | 0.4 | 0.6 |
| 0.2 | | 1.0 | 0.2 | 0.4 | 0.4 | 0.1 |
| 0.4 | | 2.6 | 1.2 | 1.7 | 0.8 | 0.8 |
| 0.6 | | 5.3 | 3.8 | 2.5 | 3.3 | 2.4 |

En el Apéndice B se pueden consultar los resultados completos tanto de las simulaciones como de las predicciones analíticas.

5.1.1.3. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito cíclico τ_{2Dlt} .

Finalmente, se realizará la comparación correspondiente para el tiempo medio de tránsito cíclico. Para ello, se calcula nuevamente la razón entre los valores obtenidos a partir de las predicciones analíticas y los resultados generados por las simulaciones con DiffConf.

En la Tabla 5.5 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito cíclico, cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulaciones de dinámica browniana.

Como podemos observar, los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicciones, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo con [BDB17d]. En la Tabla 5.6 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores; en esta se observa que el rango de porcentaje de error va desde $0 \leq \mathcal{E} \leq 3.3$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla 5.5: Comparación de los resultados para el tiempo de tránsito cíclico para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.996 | 0.989 | 1.006 | 0.999 | 1.000 |
| 0.2 | 1.014 | 0.998 | 0.988 | 0.998 | 1.017 |
| 0.4 | 1.016 | 1.003 | 1.005 | 1.014 | 1.015 |
| 0.6 | 1.017 | 1.021 | 1.011 | 1.033 | 1.029 |
| 0.8 | 1.060 | 1.054 | 1.023 | 1.048 | 1.029 |
| 1.0 | 1.097 | 1.060 | 1.068 | 1.050 | 1.052 |
| 1.2 | 1.101 | 1.111 | 1.095 | 1.092 | 1.093 |

Tabla 5.6: Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $n \rightarrow w$

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|
| Lambda | | | | | |
| 0 | 0.4 | 1.1 | 0.6 | 0.1 | 0.0 |
| 0.2 | 1.4 | 0.2 | 1.2 | 0.2 | 1.7 |
| 0.4 | 1.6 | 0.3 | 0.5 | 1.4 | 1.5 |
| 0.6 | 1.7 | 2.1 | 1.1 | 3.3 | 2.9 |

En el Apéndice C se pueden consultar los resultados completos tanto de las simulaciones como de las predicciones analíticas.

5.1.2. Canal cónico que se estrecha ($w \rightarrow n$).

5.1.2.1. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de primer arribo τ_{2Dfpt} .

Con el propósito de evaluar que los resultados son correctos para un canal que se estrecha, se realiza la comparación de los valores obtenidos a partir de las predicciones analíticas y los valores generados por las simulaciones. Esta comparación permite identificar de manera directa qué tan bien reproduce DiffConf el comportamiento esperado teóricamente. Recordemos que, cuando la relación es cercana a uno, las simulaciones reproducen adecuadamente el comportamiento esperado según la teoría. En cambio, si la relación se aleja significativamente de ese valor, indica una discrepancia notable entre el modelo teórico y los resultados de la simulación.

En la Tabla 5.7 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito directo, cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulaciones de dinámica browniana.

Tabla 5.7: Comparación de los resultados para el tiempo medio de primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.996 | 0.992 | 1.002 | 1.001 | 0.998 |
| 0.2 | 1.003 | 1.010 | 0.998 | 1.011 | 0.994 |
| 0.4 | 0.999 | 1.008 | 0.988 | 0.995 | 0.993 |
| 0.6 | 1.024 | 1.017 | 1.016 | 1.005 | 1.002 |
| 0.8 | 1.025 | 1.018 | 1.010 | 0.991 | 0.998 |
| 1.0 | 1.028 | 1.011 | 1.012 | 1.014 | 1.018 |
| 1.2 | 1.027 | 1.016 | 1.018 | 1.010 | 1.009 |

Como podemos observar, los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicciones, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo con [BDB17d]. En la Tabla 5.8 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores; en esta

se observa que el rango de porcentaje de error va desde $0.1 \leq \mathcal{E} \leq 2.4$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla 5.8: Porcentaje de error del tiempo medio de primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$

| Lambda | Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|---------------|-----------------|-----|-----|-----|-----|----|
| 0.0 | 0.4 | 0.8 | 0.2 | 0.1 | 0.2 | |
| 0.2 | 0.3 | 1.0 | 0.2 | 1.1 | 0.6 | |
| 0.4 | 0.1 | 0.8 | 1.2 | 0.5 | 0.7 | |
| 0.6 | 2.4 | 1.7 | 1.6 | 0.5 | 0.2 | |

En el Apéndice D se pueden consultar los resultados completos tanto de las simulaciones como de las predicciones analíticas.

5.1.2.2. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito directo τ_{2Dtpt} .

Al igual que con el tiempo medio de primer arribo, ahora se realizará la comparación correspondiente para el tiempo medio de tránsito directo. Para ello se calcula la razón entre los valores obtenidos a partir de las predicciones analíticas y los resultados generados por las simulaciones con el simulador DiffConf.

En la Tabla 5.9 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito directo, cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulaciones de dinámica browniana.

Tabla 5.9: Comparación de los resultados para el tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.996070 | 0.997623 | 0.992942 | 1.004323 | 0.993753 |
| 0.2 | 1.006705 | 1.004225 | 1.000070 | 1.002817 | 0.998640 |
| 0.4 | 1.015430 | 1.018737 | 1.015805 | 1.006464 | 1.009094 |
| 0.6 | 1.057917 | 1.039685 | 1.023850 | 1.026771 | 1.027503 |
| 0.8 | 1.089730 | 1.075950 | 1.062184 | 1.045854 | 1.058557 |
| 1.0 | 1.142755 | 1.111896 | 1.093488 | 1.087417 | 1.092927 |
| 1.2 | 1.185994 | 1.148361 | 1.137730 | 1.121779 | 1.126308 |

Como podemos observar, los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicciones, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo con [BDB17d]. En la Tabla 5.10 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores; en esta se observa que el rango de porcentaje de error va desde $0.01 \leq \mathcal{E} \leq 5.79$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla 5.10: Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $w \rightarrow n$

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|------|------|------|------|------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.39 | 0.24 | 0.71 | 0.43 | 0.62 |
| 0.2 | 0.67 | 0.42 | 0.01 | 0.28 | 0.14 |
| 0.4 | 1.54 | 1.87 | 1.58 | 0.65 | 0.91 |
| 0.6 | 5.79 | 3.97 | 2.38 | 2.68 | 2.75 |

En el Apéndice E se pueden consultar los resultados obtenidos tanto de las simulaciones como de las predicciones analíticas.

5.1.2.3. Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito cíclico τ_{2Dlt} .

Finalmente, se realiza la comparación correspondiente para el tiempo medio de tránsito cíclico. Para ello, se calcula la razón entre los valores obtenidos a partir de las predicciones analíticas y los resultados generados por las simulaciones con DiffConf. En la Tabla 5.11 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito cíclico, cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulaciones de dinámica browniana.

Tabla 5.11: Comparación de los resultados para el tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.9957 | 0.9893 | 1.0063 | 0.9987 | 0.9999 |
| 0.2 | 1.0011 | 1.0124 | 0.9969 | 1.0137 | 0.9927 |
| 0.4 | 0.9928 | 1.0054 | 0.9813 | 0.9924 | 0.9896 |
| 0.6 | 1.0130 | 1.0110 | 1.0138 | 1.0007 | 0.9977 |
| 0.8 | 1.0053 | 1.0043 | 1.0000 | 0.9817 | 0.9887 |
| 1.0 | 0.9974 | 0.9906 | 0.9982 | 1.0028 | 1.0080 |
| 1.2 | 0.9893 | 0.9908 | 0.9994 | 0.9941 | 0.9943 |

Como podemos observar, los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicciones, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo con [BDB17d]. En la Tabla 5.12 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores; en esta se observa que el rango de porcentaje de error va desde $0.01 \leq \mathcal{E} \leq 1.87$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla 5.12: Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $w \rightarrow n$

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|------|------|------|------|------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.43 | 1.07 | 0.63 | 0.13 | 0.01 |
| 0.2 | 0.11 | 1.24 | 0.31 | 1.37 | 0.73 |
| 0.4 | 0.72 | 0.54 | 1.87 | 0.76 | 1.04 |
| 0.6 | 1.30 | 1.10 | 1.38 | 0.07 | 0.23 |

Para obtener mayor detalle de los resultados tanto de las simulaciones como de las predicciones analíticas, consultar el Apéndice F.

5.2. Análisis de trayectorias basado en los datos obtenidos de la simulación

En esta sección presentamos los resultados obtenidos de nuestras simulaciones analizando la relación que existe entre el comportamiento de las trayectorias y las características del canal.

5.2.1. Comparación de los tiempos medios de tránsito directo obtenidos de las simulaciones en canales.

En la Tabla F.1 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito directo obtenido de las simulaciones, cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$ y cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$.

Tabla 5.13: Comparación del tiempo medio de tránsito directo obtenido de las simulaciones en canales que se expanden y canales que se estrechan.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Lambda | | | | | |
| 0 | 1.000000 | 1.000000 | 1.000000 | 1.000000 | 1.000000 |
| 0.2 | 0.996406 | 1.005807 | 1.003655 | 0.998394 | 0.999679 |
| 0.4 | 0.990059 | 1.006508 | 0.999200 | 0.998256 | 1.000868 |
| 0.6 | 1.005003 | 1.001358 | 0.998709 | 0.993767 | 1.003481 |
| 0.8 | 0.995190 | 1.001094 | 1.006629 | 0.993122 | 1.005715 |
| 1 | 0.992552 | 1.010797 | 0.986138 | 0.990658 | 1.011195 |
| 1.2 | 0.986197 | 0.986719 | 1.003864 | 0.987011 | 1.004468 |

Como podemos observar, el tiempo medio de tránsito directo es muy parecido a pesar de la forma del canal. Es decir, independientemente de si la partícula se desplaza en la dirección $n \rightarrow w$ o en la dirección opuesta, los valores del tiempo medio de tránsito directo son casi iguales. En consecuencia, se confirma la predicción teórica de que el tiempo de tránsito directo es una cantidad que no es sensible a la dirección de la difusión.

5.2.2. Interacción de las partículas con las paredes transversales del canal expansivo.

Considerando que las partículas tienen un desplazamiento aleatorio dentro del canal, el contacto con las fronteras del canal es inevitable. En la Tabla F.2 podemos observar la cantidad de interacciones que tuvieron las partículas con la pared transversal superior.

Tabla 5.14: Cantidad de interacciones con la pared transversal superior.

| Longitud \ Lambda | 0 | 0.2 | 0.4 | 0.6 | 0.8 | 1.0 | 1.2 |
|-------------------|------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 2 | 14118713 | 10736015 | 9034120 | 7911622 | 7274729 | 6889519 | 6526925 |
| 5 | 88526165 | 53845938 | 40964027 | 33754480 | 29588799 | 28004541 | 26317469 |
| 10 | 351406384 | 162013100 | 109766314 | 89232685 | 77409260 | 69240347 | 66281637 |
| 15 | 792549169 | 287440191 | 188556477 | 146757328 | 127483662 | 115040867 | 108093049 |
| 20 | 1415067023 | 424534526 | 270227726 | 210200372 | 179321932 | 163205827 | 151986973 |

Como podemos observar en la Figura 5.1, la cantidad de veces que las partículas tocan la pared transversal superior se incrementa al aumentar la longitud del canal o bien cuando λ es muy pequeña.

Histograma de la cantidad de interacciones con la pared transversal superior

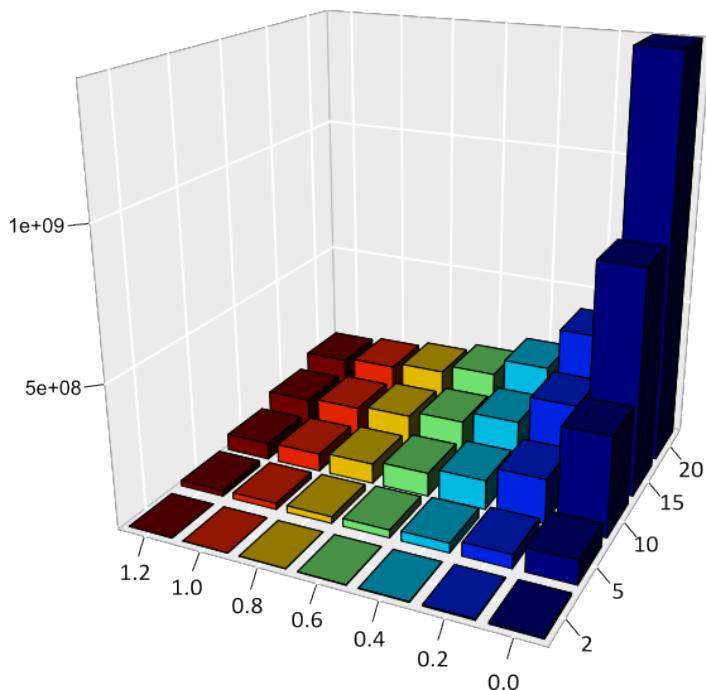


Figura 5.1: Gráficas de las interacciones partícula-pared transversal superior en un canal expansivo

En la Tabla F.3 podemos observar la cantidad de interacciones que tuvieron las partículas con la pared transversal inferior. Como vemos en la Figura 5.2, la cantidad de veces que las partículas tocan la pared transversal inferior se incrementa al aumentar la longitud del canal o bien cuando λ es muy pequeña.

Tabla 5.15: Cantidad de interacciones con la pared transversal inferior.

| Longitud \ Lambda | 0 | 0.2 | 0.4 | 0.6 | 0.8 | 1.0 | 1.2 |
|-------------------|------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 2 | 14212506 | 10514969 | 8843796 | 7903947 | 7126919 | 6767848 | 6633294 |
| 5 | 89089008 | 54167822 | 40418928 | 33928421 | 29951514 | 28415291 | 26441633 |
| 10 | 351951029 | 160947883 | 109402685 | 89515915 | 77365375 | 69605506 | 65399284 |
| 15 | 794986748 | 287472049 | 187254064 | 146309809 | 126300568 | 116196237 | 107631352 |
| 20 | 1415067023 | 421423987 | 270033161 | 208508855 | 180065479 | 161862685 | 151682333 |

Histograma de la cantidad de interacciones con la pared transversal inferior

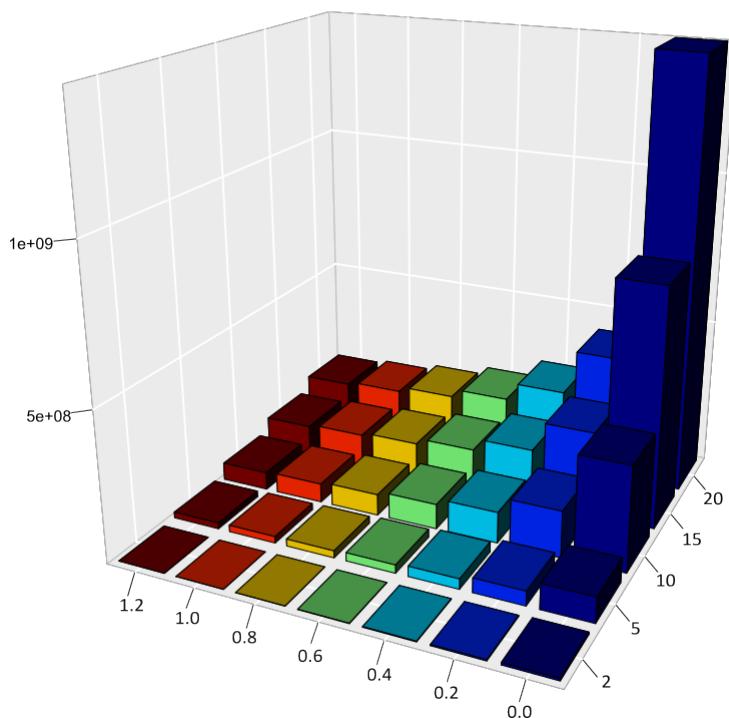


Figura 5.2: Gráficas de las interacciones partícula-pared transversal inferior en un canal expansivo

5.2.3. Interacción de las partículas con las paredes longitudinales del canal expansivo.

Debido a que una de las paredes longitudinales tiene la propiedad absorbente, que hace que la partícula finalice su proceso de difusión, solo haremos referencia a la pared longitudinal que tiene la propiedad reflejante.

En la Tabla 5.16 podemos observar la cantidad de interacciones que tuvieron las partículas con la pared longitudinal reflejante del canal.

Tabla 5.16: Cantidad de interacciones con la pared longitudinal reflejante.

| Longitud \ Lambda | 0 | 0.2 | 0.4 | 0.6 | 0.8 | 1.0 | 1.2 |
|-------------------|-----------|-----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 2 | 28284581 | 23698336 | 21639664 | 20270506 | 19007189 | 18514050 | 18202094 |
| 5 | 70714024 | 49719497 | 40578656 | 35991108 | 32428615 | 31039692 | 29662634 |
| 10 | 139718626 | 79627930 | 59435392 | 50620164 | 45313539 | 41577414 | 39577454 |
| 15 | 211844796 | 99314731 | 71843610 | 58950473 | 52690261 | 48872195 | 45946422 |
| 20 | 280921813 | 113866090 | 81199376 | 66516193 | 58249125 | 53549432 | 50210125 |

Histograma de la cantidad de interacciones con la pared longitudinal reflejante

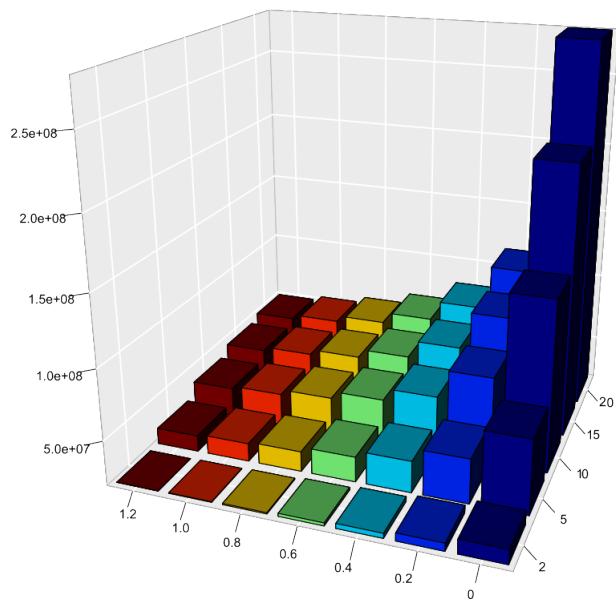


Figura 5.3: Gráficas de las interacciones partícula-pared longitudinal reflejante en un canal expansivo

Como podemos observar en la Figura 5.3, la cantidad de interacciones es mayor cuando la longitud se incrementa y λ disminuye.

5.2.4. Comparación del número de interacciones que tienen las partículas por pared

En esta sección se analizará el número de interacciones que tiene la partícula con base en la pared del canal. Para ello, nos centraremos en los casos donde se tiene un mayor número de interacciones, que es cuando se tiene el valor de λ más pequeño y la longitud del canal crece.

En la Tabla 5.17 se muestra la cantidad de interacciones que las partículas tienen con cada pared cuando el canal es estrecho, es decir, cuando $\lambda = 0$. La Gráfica 5.4 permite observar que, al aumentar el valor de λ , la frecuencia total de interacciones también se incrementa. Además, podemos observar que las interacciones con las paredes transversales superior e inferior son muy similares. Esto significa que las partículas chocan prácticamente la misma cantidad de veces con ambas paredes, lo cual indica que el movimiento dentro del canal es equilibrado y no presenta una tendencia hacia ninguna dirección vertical. Por otro lado, la pared longitudinal reflejante registra un número considerablemente menor de interacciones; esto se debe a que el movimiento de las partículas se extiende principalmente a lo largo del canal.

Tabla 5.17: Frecuencia de interacciones por pared del canal cuando $\lambda = 0$

| Pared Longitud | Transversal Superior | Transversal Inferior | Longitudinal Reflejante |
|-------------------|----------------------|----------------------|-------------------------|
| 2 | 14118713 | 14212506 | 28284581 |
| 5 | 88526165 | 89089008 | 70714024 |
| 10 | 351406384 | 351951029 | 139718626 |
| 15 | 792549169 | 794986748 | 211844796 |
| 20 | 1415067023 | 1415067023 | 280921813 |

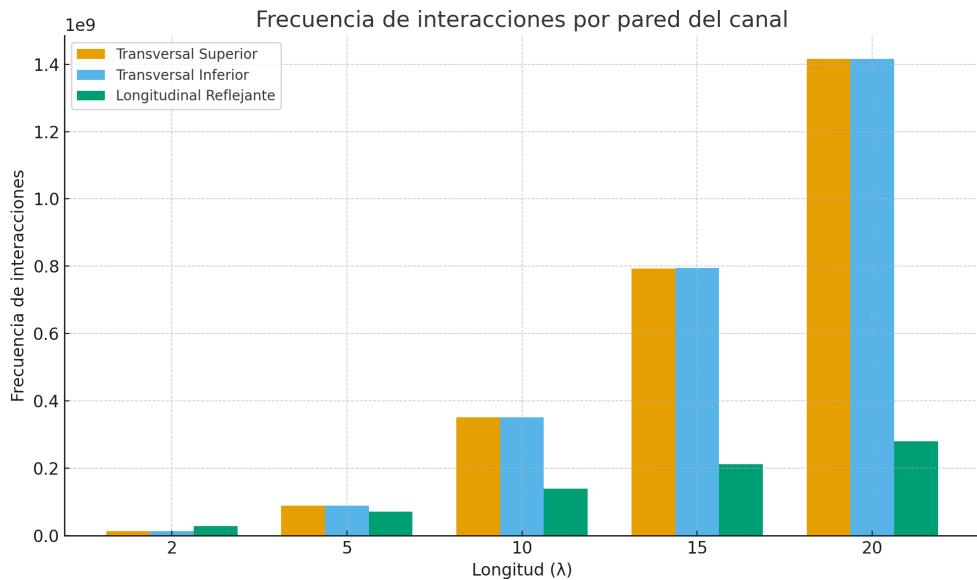


Figura 5.4: Frecuencia de interacciones por pared del canal para distintos valores de λ .

5.3. Análisis de tiempos de ejecución

En esta sección presentaremos los tiempos obtenidos al ejecutar la simulación bajo dos escenarios: sin almacenamiento de trayectorias y con almacenamiento de trayectorias completas. El primero proporciona una medida base del costo computacional del modelo, mientras que el segundo permite estimar el impacto que tiene la operación adicional de guardar información relevante de las trayectorias de las partículas.

Para realizar este análisis, nos centraremos primero en el tiempo de ejecución cuando $\lambda = 0$ y la longitud del canal es 20, ya que es el caso base para entender el comportamiento de las partículas sin modificaciones en la geometría del canal.

Posteriormente, consideramos también el escenario con $\lambda = 1,2$ manteniendo la misma longitud de 20, introduciendo una variación en la forma del canal que puede influir en el número de pasos que alcanzan las partículas. Comparar ambos casos nos permite tener una idea más clara de cómo la geometría afecta el tiempo total de simulación.

En la Tabla 5.18 se presentan los tiempos obtenidos de la simulación cuando $\lambda = 0$ y la longitud del canal es 20. Como podemos observar, el uso de hilos en la CPU reduce bastante el tiempo, en más del 75 %. Sin embargo, el uso de la GPU es lo que realmente hace la diferencia, ya que tiene una reducción de más

del 80 %, aun cuando se guardan algunas trayectorias.

También se puede ver que, al almacenar las trayectorias, los tiempos aumentan en todas las versiones. Sin embargo, la GPU sigue siendo la más rápida, luego la CPU con hilos y, al final, la versión secuencial. En cuanto al uso de la memoria, cabe mencionar que, si quisieramos guardar todas las trayectorias completas de todas las partículas, la GPU se quedaría sin memoria y la simulación sería muy lenta o no sería posible ejecutarla, ya que dependemos de la arquitectura. En cambio, al almacenar solo unas cuantas trayectorias y solo los pasos más importantes, el uso de memoria se mantiene manejable y la simulación puede ejecutarse sin perder rendimiento.

Tabla 5.18: Comparación de tiempos de ejecución con y sin trayectorias cuando $\lambda = 0$ y la longitud es de 20 en un canal expansivo

| Tiempo Versión | Sin Trayectorias | Reducción (%) | Con Trayectorias | Reducción (%) |
|---------------------------------|----------------------|------------------|----------------------|------------------|
| Secuencial | 398,769s (4.61 días) | – | 578,523s (6.70 días) | – |
| Hilos CPU | 79,986s (22.22 h) | 79.94 % | 98,983s (27.49 h) | 82.89 % |
| GPU (CUDA) | 43,897s (12.19 h) | 88.99 % | 56,676s (15.74 h) | 90.24 % |

Ahora bien, en la Tabla 5.19 podemos observar que, al tratarse de un canal en expansión, los tiempos se reducen en todos los casos. Sin embargo, la tendencia se mantiene: la GPU sigue siendo la que ofrece los tiempos más aceptables y eficientes para este tipo de simulaciones.

Tabla 5.19: Comparación de tiempos de ejecución con y sin trayectorias cuando $\lambda = 1,2$ y la longitud es de 20

| Tiempo Versión | Sin Trayectorias | Reducción (%) | Con Trayectorias | Reducción (%) |
|---------------------------------|----------------------|------------------|----------------------|------------------|
| Secuencial | 367,259s (4.25 días) | – | 498,523s (5.77 días) | – |
| Hilos CPU | 52,449s (14.57 h) | 85.72 % | 69,983s (19.44 h) | 85.96 % |
| GPU (CUDA) | 19,097s (5.30 h) | 94.80 % | 23,676s (6.58 h) | 95.25 % |

5.4. Visualización de la difusión confinada de partículas

La integración del módulo de visualización de partículas en el visualizador VisUAM permite observar el comportamiento de un conjunto de partículas dentro de un canal confinado mediante su animación. Los datos que permiten la generación de la animación son resultados del simulador *DiffConf*. Además, mediante el simulador *DiffConf* se obtiene el valor del tiempo medio de primer arribo, el tiempo medio de tránsito directo y el tiempo medio de tránsito cíclico, así como la frecuencia con la que las partículas golpean las paredes del canal, por lo que el módulo de visualización también genera gráficas en 2D que representan esta información.

En la Figura 5.5 podemos observar la visualización de la difusión confinada de partículas en canales expansivos y estrechos. Las paredes del canal tienen propiedades absorbentes, las cuales se representan como paredes de color rojo, y propiedades reflejantes que se representan como paredes de color azul.

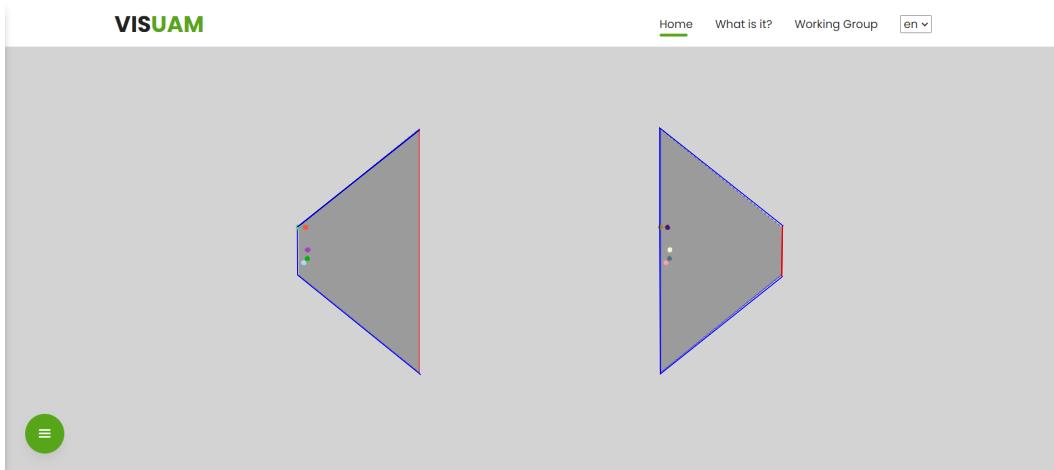


Figura 5.5: Visualización de partículas brownianas en canales bidimensionales.

En la Figura 5.6 podemos observar el menú para este tipo de visualización, el cual consta de 3 áreas: *área de control de animación* (ver etiqueta 1), *área para aislamiento* (ver etiqueta 2), *área de resultados y gráficas* (ver etiqueta 3) y el *área para finalizar la visualización* (ver etiqueta 4).

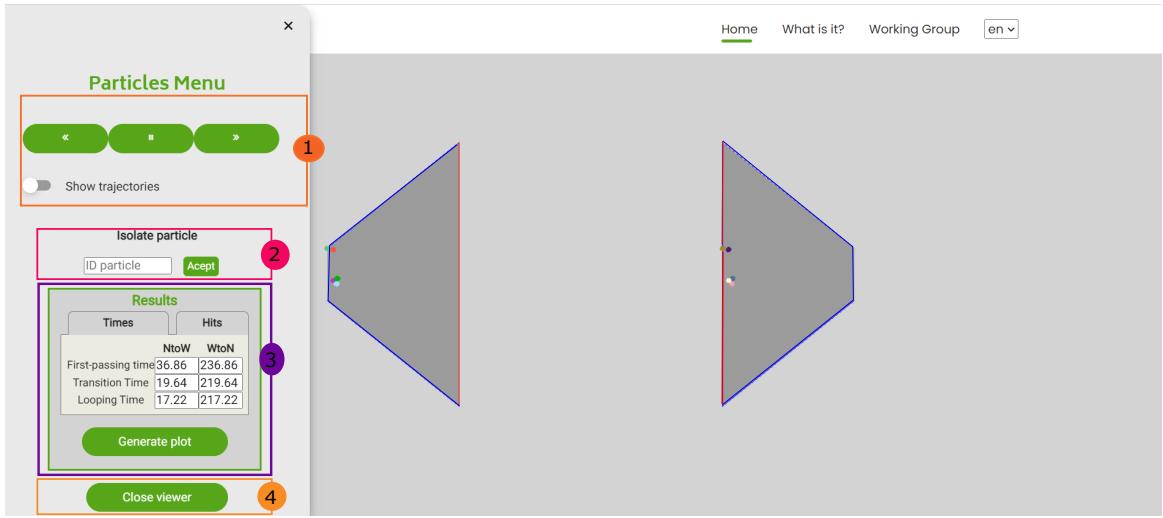


Figura 5.6: Menú del módulo de visualización de partículas.

El **área de control de animación** contiene los botones que permiten **pausar**, **retroceder** y **avanzar** la animación de la difusión de partículas dentro de un medio confinado. Como podemos observar en la Figura 5.7, el módulo de visualización permite observar el camino recorrido por cada una de las partículas al activar la opción **Ver trayectorias o Show trajectories**.

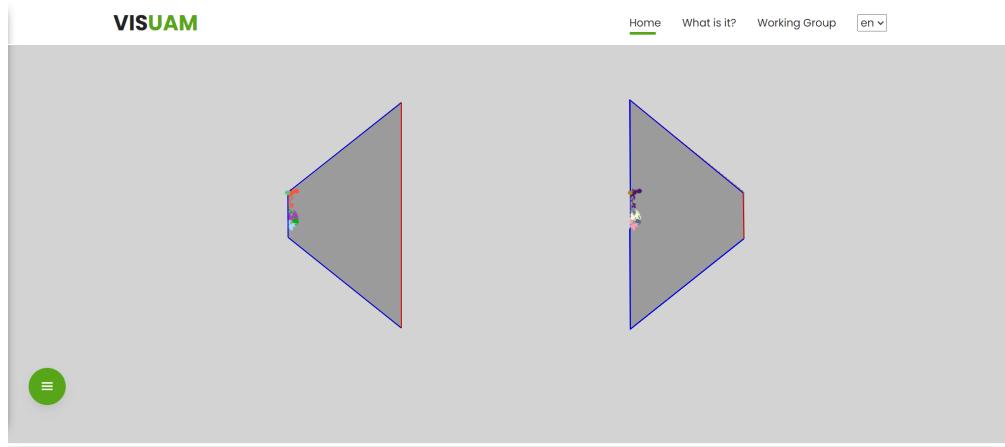


Figura 5.7: Partículas con la opción trayectorias seleccionada.

El **área de aislamiento o Isolate area** permite elegir una partícula y mostrarla de forma independiente, lo cual genera la animación de una única partícula, como podemos observar en la Figura 5.8. Para esta opción, se debe indicar cuál de las partículas se desea aislar y la animación se despliega en la parte inferior

de la vista en conjunto de las partículas. Esta animación tendrá su propio menú, que contiene el área de control de la animación y cuyas funcionalidades ya han sido explicadas previamente.

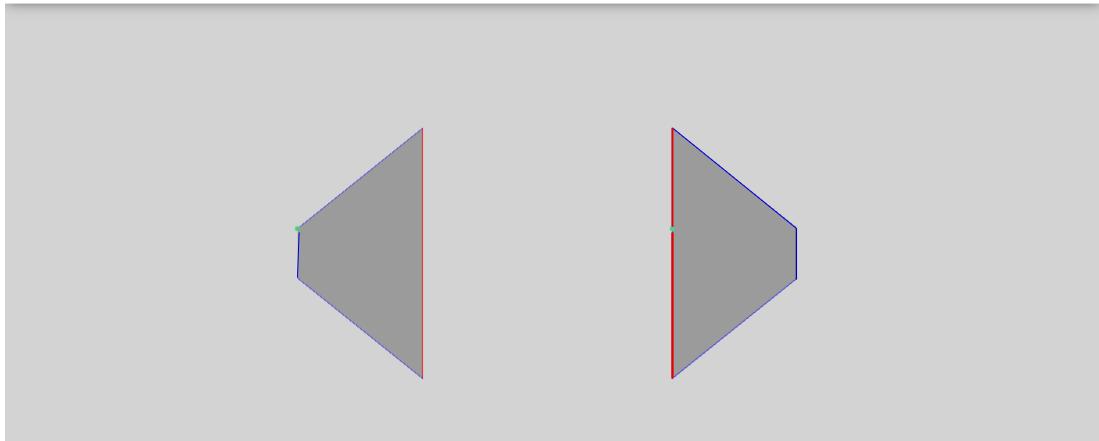


Figura 5.8: Partícula aislada

En el **área de resultados o Results area** se muestra información que es de interés en la difusión confinada, como los tiempos de primer arribo, tránsito cíclico y tránsito directo, así como la frecuencia con la que las partículas interactúan con las paredes. Como se puede observar en la Figura 5.9, se pueden generar gráficas que permiten complementar la interpretación de los resultados, las cuales pueden ser guardadas en formato JPEG o PNG.

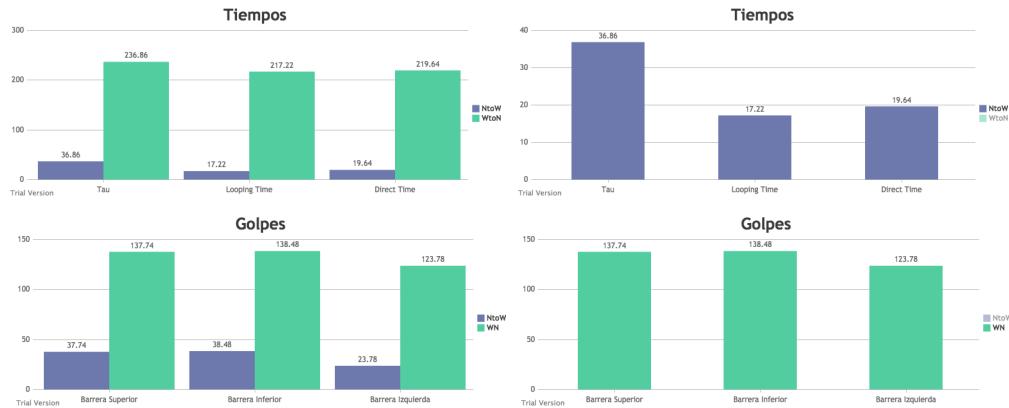


Figura 5.9: Gráficas de resultados

En el siguiente capítulo presentaremos las conclusiones generales del trabajo y algunas ideas para continuar desarrollándolo, así como posibles líneas de investigación que pueden explorarse más adelante.

Capítulo 6

Conclusiones y trabajo a futuro

El estudio realizado en esta tesis parte del interés de estudiar con mayor detenimiento el proceso de difusión en medios confinados. A lo largo del trabajo no solo basta con simular el movimiento sino que se requiere analizar las trayectorias con mayor detalle, descomponerlas, compararlas y entender cómo las paredes de un canal guían, retrasan o aceleran el proceso difusivo. Este fue la principal razón que dio origen a DiffConf, el simulador desarrollado en esta investigación.

Un aporte importante es la capacidad de modelar de manera flexible el medio de confinamiento. Mientras que la mayoría de los simuladores existentes restringen al usuario a geometrías predefinidas, el simulador DiffConf permite trabajar con canales bidimensionales ajustables, donde la longitud y la amplitud pueden especificarse directamente como parámetros del modelo.

Otro de los aportes más relevantes es el análisis estadístico de trayectorias. A diferencia de las herramientas revisadas en el estado del arte, el simulador DiffConf no solo muestra el movimiento, sino que almacena información que permite calcular tiempos característicos y determinar la frecuencia de interacción con cada pared del canal.

Al comparar nuestros resultados con las predicciones teóricas, vimos que los tiempos medios de primer arribo, de tránsito directo y de tránsito cíclico, se ajustan bien a las expresiones analíticas, siempre que los parámetros geométricos estén dentro del rango válido ($\lambda \leq 0,6$ y $L \geq 2$). El error fue menor al 6% tanto para canales en expansión como en canales en contracción, lo cual es una precisión adecuada para este tipo de simulaciones. También en nuestros resultados pudimos observar que el tiempo de transición no depende de la dirección en la que se recorra el canal.

Otro resultado interesante es que, al analizar el número de colisiones con las paredes transversales (inferior y superior) del canal, observamos que en el caso

del tubo cilíndrico (cuando $\lambda = 0$) las partículas chocan prácticamente el mismo número de veces con ambas paredes. Esto indica que el movimiento es equilibrado y no presenta preferencia por ninguna dirección vertical.

También se presentó un modelo que simula la difusión de manera sencilla pero muy eficiente, donde cada partícula se mueve por su cuenta, sin afectar ni depender de las demás, y sus desplazamientos se generan mediante pasos aleatorios propios de la Dinámica Browniana. Esta independencia permitió diseñar algoritmos paralelos donde, en una CPU, cada hilo puede encargarse de un grupo de partículas, o bien, en una GPU, cada hilo puede simular una sola partícula. Gracias a ello se logró una reducción significativa en los tiempos de ejecución: con la versión multicore se obtiene una disminución de al menos el 80 % respecto al tiempo secuencial, y con la versión en GPU la reducción alcanza al menos el 90 %, lo que hace posible trabajar con conjuntos grandes de partículas.

Un reto importante durante esta implementación fue la correcta generación de números aleatorios, ya que cada partícula debe recibir valores distintos e independientes para evitar que se altere el comportamiento difusivo. En CPU esto se resolvió asignando un generador independiente por hilo, mientras que en la GPU fue necesario inicializar un generador por cada hilo del kernel, asegurando que cada partícula tuviera su propia secuencia aleatoria. Resolver este problema fue clave para garantizar que los resultados fueran físicamente consistentes y reproducibles en entornos paralelos.

Finalmente, en este trabajo se presentó el visualizador VisUAM, una herramienta diseñada para mostrar elementos de distintos tipos de datos y adaptarse a necesidades específicas. VisUAM funciona directamente desde un servidor web, lo que elimina por completo la instalación de software adicional. Gracias a ello, se convierte en un visualizador multiplataforma, compatible con diversos sistemas operativos y navegadores.

El diseño de VisUAM también permite integrar nuevas visualizaciones a partir de datos generados por diferentes aplicaciones, siempre que sigan la estructura del formato vsm. Al extender las funcionalidades del visualizador, los usuarios no necesitan instalar nuevos paquetes o bibliotecas; basta con recargar el navegador para utilizar las nuevas capacidades.

En particular, una aportación importante de este trabajo fue el desarrollo de un módulo que permite visualizar, mediante una animación, el comportamiento de las partículas dentro del canal cónico durante el proceso de difusión. Además, se generaron gráficas que facilitan la comprensión de los tiempos asociados al fenómeno y de la frecuencia de las interacciones partícula-pared. Esta visualización no solo complementa al simulador, sino que también permite entender de forma más clara lo que ocurre dentro del canal durante la difusión, ofreciendo al usuario una representación visual accesible y enfocada en los datos más relevantes.

En conjunto, los resultados muestran que el simulador *DiffConf* permite es-

tudiar la difusión confinada desde la perspectiva de las trayectorias, en los cuales es posible trabajar con geometrías que se pueden configurar y aprovechar de manera eficiente arquitecturas paralelas . Esto da pauta a posible trabajo a futuro que pueden ampliar las capacidades del modelo y profundizar en el estudio de las trayectorias difusivas dentro de un canal confinado. Entre las posibles líneas de trabajo que se pueden trabajar tenemos:

- Extender el modelo a geometrías más complejas, incluyendo canales no simétricos, curvos o con variaciones de ancho no lineales.
- Explorar geometrías tridimensionales, donde los efectos geométricos adicionales pueden modificar de manera importante los tiempos característicos.
- Determinar las zonas de mayor concentración de partículas dentro del canal, con el propósito de identificar regiones de concentración.
- Identificar qué parte de las paredes longitudinales y transversales del canal reciben más colisiones.
- Analizar el área de salida de las partículas para estudiar cómo la forma del canal influye en los patrones de escape y tránsito.

Un aspecto importante para estas líneas de trabajo es que calcular áreas de concentración, ya sea dentro del canal, sobre las paredes o en la zona de salida, requiere almacenar las coordenadas de cada interacción o incluso registrar la trayectoria completa de cada partícula. Esto en la versión multicore es factible, aunque implica un incremento en el tiempo de ejecución debido a la cantidad de información que se debe almacenar. Sin embargo, el reto principal se presenta en la implementación en GPU, donde la memoria disponible es limitada y almacenar miles de trayectorias completas puede afectar tanto el rendimiento como la viabilidad de la simulación. Será necesario evaluar cuidadosamente cómo impacta este almacenamiento en el desempeño general del simulador y diseñar estrategias que permitan equilibrar el nivel de detalle, e uso de memoria y el tiempo de ejecución.

Además de las posibles líneas de trabajo para ampliar las capacidades del simulador *DiffConf*, también existe un espacio importante para continuar desarrollando el visualizador VisUAM, ya que su función es complementar y hacer más accesible la interpretación de los resultados generados por el simulador. A medida que el modelo incorpore nuevas geometrías, mayores volúmenes de datos o información más detallada como áreas de concentración, zonas de mayor contacto o distribución espacial de las interacciones, será necesario que VisUAM se amplíe para poder representar estos elementos de manera clara y eficiente.

En este sentido, el trabajo a futuro sobre VisUAM puede centrarse:

-
- Integrar nuevas visualizaciones de manera modular mediante la creación de nuevas clases.
 - Mejorar VisUAM para manejar conjuntos de datos más grandes, incluidos aquellos en el rango de gigabytes, permitiendo la lectura de archivos binarios cuando el tamaño del archivo VSM sea muy grande..
 - Extender las funcionalidades de las visualizaciones existentes.
 - Implementar un explorador de archivos web y un sistema de almacenamiento para los datos de entrada de los usuarios.

Apéndice A

Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de primer arribo τ_{2Dfpt} para un canal cónico que se expande $n \rightarrow w$

En este apéndice se presentan de manera detallada los resultados numéricos obtenidos para el tiempo medio de primer arribo en la transición $n \rightarrow w$, considerando diferentes valores de la longitud del canal L y del parámetro geométrico λ . La Tabla A.1 muestra los resultados obtenidos por las simulaciones para cada combinación de parámetros, los cuales serán comparados más adelante con las predicciones analíticas.

En la Tabla A.2 se presentan los resultados obtenidos de las predicciones analíticas cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$ en función de L y λ usando la Ecuación 2.28.

En la Tabla A.3 presentamos una comparación del tiempo medio de primer arribo cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$, analizando su dependencia con respecto a L y λ . Esta comparación se realiza entre los valores obtenidos mediante las predicciones teóricas y los resultados generados por las simulaciones de dinámica Browniana. Para ello, se calcula el cociente entre los tiempos medios estimados teóricamente y los tiempos obtenidos por simulación. La tabla muestra precisamente esta relación, lo que permite evaluar de manera directa el grado de

concordancia entre el modelo teórico y los resultados numéricos generados por DiffConf.

Tabla A.1: Tiempo medio de primer arribo de $n \rightarrow w$ obtenido por simulaciones

| Lamda \ Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|------------------|----------|-----------|-----------|------------|------------|
| 0.0 | 2.008363 | 12.599867 | 49.910322 | 112.432676 | 200.438678 |
| 0.2 | 1.795433 | 10.235946 | 37.036396 | 77.31605 | 130.637669 |
| 0.4 | 1.714484 | 9.460081 | 33.750195 | 71.688542 | 122.831786 |
| 0.6 | 1.690412 | 9.157645 | 33.365323 | 70.434216 | 122.441223 |
| 0.8 | 1.657613 | 9.035831 | 33.604311 | 71.757276 | 125.173279 |
| 1.0 | 1.646872 | 9.243755 | 33.548185 | 73.446301 | 128.881043 |
| 1.2 | 1.680575 | 9.194705 | 34.602566 | 75.068718 | 132.001270 |

Tabla A.2: Tiempo medio de primer arribo de $n \rightarrow w$ obtenido por las predicciones analíticas

| Lamda \ Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|------------------|----------|-----------|-----------|------------|------------|
| 0.0 | 2.000000 | 12.500000 | 50.000000 | 112.500000 | 200.000000 |
| 0.2 | 1.817768 | 10.218731 | 36.745858 | 77.429625 | 131.595692 |
| 0.4 | 1.748372 | 9.531337 | 34.133995 | 72.449804 | 124.185749 |
| 0.6 | 1.744852 | 9.427407 | 34.007670 | 72.778978 | 125.573822 |
| 0.8 | 1.782618 | 9.624585 | 35.016009 | 75.431775 | 130.760172 |
| 1.0 | 1.847081 | 10.000177 | 36.670639 | 79.403936 | 138.118147 |
| 1.2 | 1.929203 | 10.489264 | 38.731761 | 84.210345 | 146.861046 |

Tabla A.3: Comparación de los resultados para el tiempo medio de primer arribo para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Lamda | Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|--------------|-----------------|----------|----------|----------|----------|----|
| 0 | 0.995836 | 0.992074 | 1.001797 | 1.000599 | 0.997811 | |
| 0.2 | 1.012440 | 0.998318 | 0.992155 | 1.001469 | 1.007333 | |
| 0.4 | 1.019766 | 1.007532 | 1.011372 | 1.010619 | 1.011023 | |
| 0.6 | 1.032205 | 1.029458 | 1.019252 | 1.033290 | 1.025585 | |
| 0.8 | 1.075413 | 1.065158 | 1.042009 | 1.051207 | 1.044633 | |
| 1.0 | 1.121569 | 1.081831 | 1.093074 | 1.081116 | 1.071672 | |
| 1.2 | 1.147942 | 1.140794 | 1.119332 | 1.121777 | 1.112573 | |

Como podemos observar los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicción, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo a [BDB17d]. En la Tabla A.4 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores, en esta se observa que rango de porcentaje de error va desde $0.06 \leq \mathcal{E} \leq 3.30$, lo cual es posible considerar como un margen de error tolerable.

Tabla A.4: Porcentaje de error del tiempo medio de primer arribo para la difusión de $n \rightarrow w$

| Lamda | Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|--------------|-----------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| 0 | 0 | 0.4 | 0.8 | 0.2 | 0.1 | 0.2 |
| 0.2 | 0.2 | 1.2 | 0.2 | 0.8 | 0.1 | 0.7 |
| 0.4 | 0.4 | 2.0 | 0.8 | 1.1 | 1.1 | 1.1 |
| 0.6 | 0.6 | 3.2 | 2.9 | 1.9 | 3.3 | 2.6 |

Apéndice B

Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito directo τ_{2Dtp} para un canal cónico que se expande $n \rightarrow w$.

En este apéndice se presentan de manera detallada los resultados numéricos obtenidos para el tiempo medio de primer arribo en la transición $n \rightarrow w$, considerando diferentes valores de la longitud del canal L y del parámetro geométrico λ .

En la Tabla B.1 se muestra los resultados obtenidos por simulaciones del tiempo medio de tránsito directo en función L y λ cuando las partículas se dirigen de $n \rightarrow w$.

Por otro lado, en la Tabla B.2 se presentan los resultados obtenidos de las predicciones analíticas cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$ en función L y λ usando la Ecuación 2.32.

En la Tabla B.3 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito directo, cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulación de dinámica Browniana.

Tabla B.1: Tiempo medio de tránsito directo de $n \rightarrow w$ obtenidas de las simulaciones

| Lamda \ Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|------------------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|
| Lamda | | | | | |
| 0.0 | 0.669297 | 4.176594 | 16.785129 | 37.338603 | 67.08578 |
| 0.2 | 0.669809 | 4.26158 | 17.273867 | 38.960688 | 70.287183 |
| 0.4 | 0.687197 | 4.410996 | 17.914799 | 41.271132 | 74.274069 |
| 0.6 | 0.710272 | 4.589009 | 19.052201 | 43.284554 | 78.687721 |
| 0.8 | 0.732490 | 4.778017 | 20.010433 | 45.959694 | 82.877421 |
| 1.0 | 0.751473 | 5.054131 | 20.655775 | 47.855949 | 87.609053 |
| 1.2 | 0.777331 | 5.176373 | 21.927268 | 50.161814 | 91.650056 |

Tabla B.2: Tiempo medio de tránsito directo de $n \rightarrow w$ obtenidas de las predicciones

| Lamda \ Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|------------------|----------|----------|-----------|-----------|------------|
| Lamda | | | | | |
| 0.0 | 0.666667 | 4.166667 | 16.666667 | 37.500000 | 66.666667 |
| 0.2 | 0.676732 | 4.254876 | 17.212179 | 39.133271 | 70.214102 |
| 0.4 | 0.704807 | 4.464587 | 18.212509 | 41.610471 | 74.884473 |
| 0.6 | 0.747668 | 4.764653 | 19.531802 | 44.722083 | 80.571382 |
| 0.8 | 0.802074 | 5.135286 | 21.114785 | 48.398960 | 87.231921 |
| 1.0 | 0.865194 | 5.559641 | 22.904342 | 52.530105 | 94.690238 |
| 1.2 | 0.934814 | 6.024353 | 24.851290 | 57.010972 | 102.767044 |

Tabla B.3: Comparación de los resultados para el tiempo de tránsito directo para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Lamda \ Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0.0 | 0.996 | 0.998 | 0.993 | 1.004 | 0.994 |
| 0.2 | 1.010 | 0.998 | 0.996 | 1.004 | 0.999 |
| 0.4 | 1.026 | 1.012 | 1.017 | 1.008 | 1.008 |
| 0.6 | 1.053 | 1.038 | 1.025 | 1.033 | 1.024 |
| 0.8 | 1.095 | 1.075 | 1.055 | 1.053 | 1.053 |
| 1.0 | 1.151 | 1.100 | 1.109 | 1.098 | 1.081 |
| 1.2 | 1.203 | 1.164 | 1.133 | 1.137 | 1.121 |

Como podemos observar los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicción, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo a [BDB17d]. En la Tabla B.4 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores, en esta se observa que rango de porcentaje de error va desde $0.1 \leq \mathcal{E} \leq 5.3$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla B.4: Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $n \rightarrow w$

| Lamda \ Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|------------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| 0 | 0.4 | 0.2 | 0.7 | 0.4 | 0.6 |
| 0.2 | 1.0 | 0.2 | 0.4 | 0.4 | 0.1 |
| 0.4 | 2.6 | 1.2 | 1.7 | 0.8 | 0.8 |
| 0.6 | 5.3 | 3.8 | 2.5 | 3.3 | 2.4 |

Apéndice C

Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito cíclico τ_{2Dlt} para un canal cónico que se expande $n \rightarrow w$.

En este apéndice se presentan de manera detallada los resultados numéricos obtenidos para el tiempo medio de tránsito cíclico en la transición $n \rightarrow w$, considerando distintos valores de la longitud del canal L y del parámetro geométrico λ .

En la Tabla C.1 se muestran los valores obtenidos mediante simulaciones del tiempo medio de tránsito cíclico en función de L y λ cuando las partículas se desplazan de $n \rightarrow w$.

Por otro lado, en la Tabla C.2 se presentan los resultados correspondientes a las predicciones analíticas para esta misma transición, calculados en función de L y λ utilizando la Ecuación 2.33.

Finalmente, en la Tabla C.3 se muestra la comparación entre el tiempo medio de tránsito cíclico obtenido a partir de las predicciones teóricas y el generado por las simulaciones de dinámica Browniana para el caso $n \rightarrow w$.

Tabla C.1: Tiempo medio de tránsito cíclico de $n \rightarrow w$ obtenidas de las simulaciones

| Lamda \ Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|------------------|-----------|-----------|------------|------------|-------------|
| Lamda | | | | | |
| 0.0 | 1.3390650 | 8.4232730 | 33.1251930 | 75.0940730 | 133.3528990 |
| 0.2 | 1.1256230 | 5.9743650 | 19.7625290 | 38.3553620 | 60.3504860 |
| 0.4 | 1.0272870 | 5.0490850 | 15.8353970 | 30.4174100 | 48.5577170 |
| 0.6 | 0.9801400 | 4.5686360 | 14.3131220 | 27.1496620 | 43.7535020 |
| 0.8 | 0.9251230 | 4.2578140 | 13.5938780 | 25.7985920 | 42.2958580 |
| 1.0 | 0.8953980 | 4.1896240 | 12.8924090 | 25.5903530 | 41.2719900 |
| 1.2 | 0.9035440 | 4.0183310 | 12.6752990 | 24.9069040 | 40.3511840 |

Tabla C.2: Tiempo medio de tránsito cíclico de $n \rightarrow w$ obtenidas de las predicciones

| Lamda \ Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|------------------|---------|---------|----------|----------|-----------|
| Lamda | | | | | |
| 0 | 1.33333 | 8.33333 | 33.33333 | 75.00000 | 133.33333 |
| 0.2 | 1.14103 | 5.96385 | 19.53368 | 38.29635 | 61.38158 |
| 0.4 | 1.04356 | 5.06675 | 15.92148 | 30.83933 | 49.30127 |
| 0.6 | 0.99718 | 4.66275 | 14.47586 | 28.05689 | 45.00243 |
| 0.8 | 0.98054 | 4.48929 | 13.90122 | 27.03281 | 43.52825 |
| 1.0 | 0.98188 | 4.44053 | 13.76629 | 26.87383 | 43.42790 |
| 1.2 | 0.99438 | 4.46491 | 13.88047 | 27.19937 | 44.09400 |

Como podemos observar los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicción, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo a [BDB17d]. En la Tabla C.4 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores, en esta se observa que

rango de porcentaje de error va desde $0 \leq \mathcal{E} \leq 3.3$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla C.3: Comparación de los resultados para el tiempo de tránsito cíclico para la difusión de $n \rightarrow w$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Lamda | Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|--------------|-----------------|-------|-------|-------|-------|----|
| 0.0 | 0.996 | 0.989 | 1.006 | 0.999 | 1.000 | |
| 0.2 | 1.014 | 0.998 | 0.988 | 0.998 | 1.017 | |
| 0.4 | 1.016 | 1.003 | 1.005 | 1.014 | 1.015 | |
| 0.6 | 1.017 | 1.021 | 1.011 | 1.033 | 1.029 | |
| 0.8 | 1.060 | 1.054 | 1.023 | 1.048 | 1.029 | |
| 1.0 | 1.097 | 1.060 | 1.068 | 1.050 | 1.052 | |
| 1.2 | 1.101 | 1.111 | 1.095 | 1.092 | 1.093 | |

Tabla C.4: Porcentaje de error del tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $n \rightarrow w$

| Lamda | Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|--------------|-----------------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|
| 0 | 0.4 | 0.4 | 1.1 | 0.6 | 0.1 | 0.0 |
| 0.2 | 1.4 | 0.2 | 1.2 | 0.2 | 1.7 | |
| 0.4 | 1.6 | 0.3 | 0.5 | 1.4 | 1.5 | |
| 0.6 | 1.7 | 2.1 | 1.1 | 3.3 | 2.9 | |

Apéndice D

Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de primer arribo τ_{2Dfpt} para un canal cónico que se estrecha $w \rightarrow \mathbf{n}$

En este apéndice se presentan de manera detallada los resultados numéricos obtenidos para el tiempo medio de primer arribo en la transición $w \rightarrow n$, considerando diferentes valores de la longitud del canal L y del parámetro geométrico λ .

En la Tabla D.1 se muestra los resultados obtenidos por simulaciones del tiempo medio de primer arribo en función L y λ cuando las partículas se dirigen de $w \rightarrow n$.

Tabla D.1: Tiempo medio de primer arribo de $w \rightarrow n$ obtenidas de las simulaciones

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|-----------|-----------|------------|------------|------------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 2.0008363 | 12.599867 | 49.910322 | 112.432676 | 200.438578 |
| 0.2 | 2.266884 | 15.953492 | 74.741399 | 183.894061 | 359.826886 |
| 0.4 | 2.579710 | 19.173997 | 93.891801 | 235.593639 | 456.576370 |
| 0.6 | 2.854959 | 22.261688 | 108.337953 | 277.470093 | 537.794526 |
| 0.8 | 3.236085 | 25.701684 | 126.564636 | 326.721334 | 626.370026 |
| 1.0 | 3.647512 | 29.594428 | 144.785779 | 365.597943 | 701.743887 |
| 1.2 | 4.106229 | 33.414939 | 163.295434 | 415.896782 | 800.978063 |

Por otro lado, en la Tabla D.2 se presentan los resultados obtenidos de las predicciones analíticas cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ en función L y λ usando la Ecuación 2.30.

Tabla D.2: Tiempo medio de primer arribo de $w \rightarrow n$ obtenidas de las predicciones

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|-----------|-----------|------------|------------|------------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 2.0008363 | 12.599867 | 49.910322 | 112.432676 | 200.438578 |
| 0.2 | 2.266884 | 15.953492 | 74.741399 | 183.894061 | 359.826886 |
| 0.4 | 2.579710 | 19.173997 | 93.891801 | 235.593639 | 456.576370 |
| 0.6 | 2.854959 | 22.261688 | 108.337953 | 277.470093 | 537.794526 |
| 0.8 | 3.236085 | 25.701684 | 126.564636 | 326.721334 | 626.370026 |
| 1.0 | 3.647512 | 29.594428 | 144.785779 | 365.597943 | 701.743887 |
| 1.2 | 4.106229 | 33.414939 | 163.295434 | 415.896782 | 800.978063 |

En la Tabla D.3 se presenta una comparación del tiempo medio de transito directo, cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulación de dinámica Browniana.

Tabla D.3: Comparación de los resultados para el tiempo medio de primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.996 | 0.992 | 1.002 | 1.001 | 0.998 |
| 0.2 | 1.003 | 1.010 | 0.998 | 1.011 | 0.994 |
| 0.4 | 0.999 | 1.008 | 0.988 | 0.995 | 0.993 |
| 0.6 | 1.024 | 1.017 | 1.016 | 1.005 | 1.002 |
| 0.8 | 1.025 | 1.018 | 1.010 | 0.991 | 0.998 |
| 1.0 | 1.028 | 1.011 | 1.012 | 1.014 | 1.018 |
| 1.2 | 1.027 | 1.016 | 1.018 | 1.010 | 1.009 |

Como podemos observar los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicción, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo a [BDB17d]. En la Tabla D.4 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores, en esta se observa que rango de porcentaje de error va desde $0.1 \leq \mathcal{E} \leq 2.4$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla D.4: Porcentaje de error del tiempo medio primer arribo para la difusión de $w \rightarrow n$

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.4 | 0.8 | 0.2 | 0.1 | 0.2 |
| 0.2 | 0.3 | 1.0 | 0.2 | 1.1 | 0.6 |
| 0.4 | 0.1 | 0.8 | 1.2 | 0.5 | 0.7 |
| 0.6 | 2.4 | 1.7 | 1.6 | 0.5 | 0.2 |

Apéndice E

Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito directo τ_{2Dtp} para un canal cónico que se estrecha $w \rightarrow n$

En este apéndice se presentan los resultados numéricos obtenidos para el tiempo medio de tránsito directo en la transición $w \rightarrow n$, considerando diferentes valores de la longitud del canal L y del parámetro geométrico λ .

En la Tabla E.1 se muestra los resultados obtenidos por simulaciones del tiempo medio de tránsito directo en función L y λ cuando las partículas se dirigen de $w \rightarrow n$.

Por otro lado, en la Tabla E.2 se presentan los resultados obtenidos de las predicciones analíticas cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ en función L y λ usando la Ecuación 2.32.

Tabla E.1: Tiempo medio de tránsito directo de $w \rightarrow n$ obtenidas de las simulaciones

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.669297 | 4.176594 | 16.785129 | 37.338603 | 67.085780 |
| 0.2 | 0.672225 | 4.236974 | 17.210967 | 39.023354 | 70.309751 |
| 0.4 | 0.694097 | 4.382473 | 17.929145 | 41.343247 | 74.209643 |
| 0.6 | 0.706736 | 4.582786 | 19.076824 | 43.556052 | 78.414735 |
| 0.8 | 0.736030 | 4.772794 | 19.878652 | 46.276974 | 82.406446 |
| 1.0 | 0.757112 | 5.000144 | 20.946132 | 48.307233 | 86.639160 |
| 1.2 | 0.788211 | 5.246046 | 21.842876 | 50.821942 | 91.242370 |

Tabla E.2: Tiempo medio de tránsito directo de $w \rightarrow n$ obtenidas de las predicciones

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|----------|----------|-----------|-----------|------------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.666667 | 4.166667 | 16.666667 | 37.500000 | 66.666667 |
| 0.2 | 0.676732 | 4.254876 | 17.212179 | 39.133271 | 70.214102 |
| 0.4 | 0.704807 | 4.464587 | 18.212509 | 41.610471 | 74.884473 |
| 0.6 | 0.747668 | 4.764653 | 19.531802 | 44.722083 | 80.571382 |
| 0.8 | 0.802074 | 5.135286 | 21.114785 | 48.389860 | 87.231921 |
| 1.0 | 0.865194 | 5.559641 | 22.904342 | 52.530105 | 94.690238 |
| 1.2 | 0.934814 | 6.024353 | 24.851290 | 57.010972 | 102.767044 |

En la Tabla E.3 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito directo, cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulación de dinámica Browniana.

Tabla E.3: Comparación de los resultados para el tiempo medio de tránsito directo para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.996070 | 0.997623 | 0.992942 | 1.004323 | 0.993753 |
| 0.2 | 1.006705 | 1.004225 | 1.000070 | 1.002817 | 0.998640 |
| 0.4 | 1.015430 | 1.018737 | 1.015805 | 1.006464 | 1.009094 |
| 0.6 | 1.057917 | 1.039685 | 1.023850 | 1.026771 | 1.027503 |
| 0.8 | 1.089730 | 1.075950 | 1.062184 | 1.045854 | 1.058557 |
| 1.0 | 1.142755 | 1.111896 | 1.093488 | 1.087417 | 1.092927 |
| 1.2 | 1.185994 | 1.148361 | 1.137730 | 1.121779 | 1.126308 |

Como podemos observar los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicción, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo a [BDB17d]. En la Tabla E.4 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores, en esta se observa que rango de porcentaje de error va desde $0.01 \leq \mathcal{E} \leq 5.79$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla E.4: Porcentaje de error del tiempo medio primer arriba para la difusión de $w \rightarrow n$

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|------|------|------|------|------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.39 | 0.24 | 0.71 | 0.43 | 0.62 |
| 0.2 | 0.67 | 0.42 | 0.01 | 0.28 | 0.14 |
| 0.4 | 1.54 | 1.87 | 1.58 | 0.65 | 0.91 |
| 0.6 | 5.79 | 3.97 | 2.38 | 2.68 | 2.75 |

Apéndice F

Evaluación de la correctitud para el tiempo medio de tránsito cíclico τ_{2Dtp} para un canal cónico que se estrecha $w \rightarrow n$

En este apéndice se presentan los resultados numéricos obtenidos para el tiempo medio de tránsito cíclico en la transición $w \rightarrow n$, considerando diferentes valores de la longitud del canal L y del parámetro geométrico λ .

En la Tabla F.1 se muestra los resultados obtenidos por simulaciones del tiempo medio de tránsito cíclico en función L y λ cuando las partículas se dirigen de $w \rightarrow n$.

Por otro lado, en la Tabla F.2 se presentan los resultados obtenidos de las predicciones analíticas cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ en función L y λ usando la Ecuación 2.34.

Tabla F.1: Tiempo medio de tránsito cíclico de $w \rightarrow n$ obtenidas de las simulaciones

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|---------|----------|-----------|-----------|-----------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 1.33907 | 8.42327 | 33.12519 | 75.09407 | 133.35290 |
| 0.2 | 1.59466 | 11.71652 | 57.53043 | 144.81771 | 289.51714 |
| 0.4 | 1.88561 | 14.79692 | 75.96266 | 194.25039 | 382.36673 |
| 0.6 | 2.14822 | 17.67890 | 89.26113 | 233.85126 | 459.37979 |
| 0.8 | 2.50006 | 20.92889 | 106.68598 | 280.44436 | 543.96358 |
| 1.0 | 2.89040 | 24.59428 | 123.83965 | 317.27221 | 615.10474 |
| 1.2 | 3.31802 | 28.16889 | 141.45256 | 365.07484 | 709.73569 |

Tabla F.2: Tiempo medio de tránsito cíclico de $w \rightarrow n$ obtenidas de las predicciones

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|----------|-----------|------------|------------|------------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 1.333333 | 8.333333 | 33.333333 | 75.000000 | 133.333333 |
| 0.2 | 1.596439 | 11.862365 | 57.352702 | 146.796820 | 287.392065 |
| 0.4 | 1.872117 | 14.876451 | 74.545291 | 192.779810 | 378.377283 |
| 0.6 | 2.176193 | 17.873177 | 90.490131 | 234.009700 | 458.325470 |
| 0.8 | 2.513326 | 21.019488 | 106.689071 | 275.314576 | 537.821538 |
| 1.0 | 2.882912 | 24.563615 | 123.610724 | 318.162583 | 620.001015 |
| 1.2 | 3.282393 | 27.910611 | 141.365074 | 362.930031 | 705.682707 |

En la Tabla F.3 se presenta una comparación del tiempo medio de tránsito cíclico, cuando las partículas se desplazan de $w \rightarrow n$ entre los resultados obtenidos por las predicciones teóricas y las simulación de dinámica Browniana.

Tabla F.3: Comparación de los resultados para el tiempo medio de tránsito cíclico para la difusión de $w \rightarrow n$ entre las predicciones y las simulaciones.

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.9957 | 0.9893 | 1.0063 | 0.9987 | 0.9999 |
| 0.2 | 1.0011 | 1.0124 | 0.9969 | 1.0137 | 0.9927 |
| 0.4 | 0.9928 | 1.0054 | 0.9813 | 0.9924 | 0.9896 |
| 0.6 | 1.0130 | 1.0110 | 1.0138 | 1.0007 | 0.9977 |
| 0.8 | 1.0053 | 1.0043 | 1.0000 | 0.9817 | 0.9887 |
| 1.0 | 0.9974 | 0.9906 | 0.9982 | 1.0028 | 1.0080 |
| 1.2 | 0.9893 | 0.9908 | 0.9994 | 0.9941 | 0.9943 |

Como podemos observar los resultados obtenidos no son muy diferentes de los resultados obtenidos por las predicción, considerando que para $\lambda \leq 0.6$, $a = D_0 = 1$ y $L \geq 2$ los resultados obtenidos por predicción de la difusión en canales bidimensionales son razonablemente precisos de acuerdo a [BDB17d]. En la Tabla F.4 se presenta el porcentaje de error (\mathcal{E}) para estos valores, en esta se observa que rango de porcentaje de error va desde $0.01 \leq \mathcal{E} \leq 1.87$, lo cual es posible considerar un error tolerable.

Tabla F.4: Porcentaje de error del tiempo medio primer arriba para la difusión de $w \rightarrow n$

| Longitud | 2 | 5 | 10 | 15 | 20 |
|-----------------|------|------|------|------|------|
| Lambda | | | | | |
| 0.0 | 0.43 | 1.07 | 0.63 | 0.13 | 0.01 |
| 0.2 | 0.11 | 1.24 | 0.31 | 1.37 | 0.73 |
| 0.4 | 0.72 | 0.54 | 1.87 | 0.76 | 1.04 |
| 0.6 | 1.30 | 1.10 | 1.38 | 0.07 | 0.23 |

Bibliografía

- [And16] Steven S Andrews. Smoldyn: particle-based simulation with rule-based modeling, improved molecular interaction and a library interface. *Bioinformatics*, 33(5):710–717, 12 2016. [31](#), [32](#)
- [BB02] Thomas Bickel and Robijn Bruinsma. The nuclear pore complex mystery and anomalous diffusion in reversible gels. *Biophysical Journal*, 83(6):3079 – 3087, 2002. [9](#)
- [BDB15] A. M. Berezhkovskii, L. Dagdug, and S. M. Bezrukov. Range of applicability of modified Fick-Jacobs equation in two dimensions. *J Chem Phys*, 143(16):164102, Oct 2015. [22](#)
- [BDB17a] Alexander M. Berezhkovskii, Leonardo Dagdug, and Sergey M. Bezrukov. First passage, looping, and direct transition in expanding and narrowing tubes: Effects of the entropy potential. *The Journal of Chemical Physics*, 147(13):134104, 2017. [15](#), [17](#)
- [BDB17b] Alexander M. Berezhkovskii, Leonardo Dagdug, and Sergey M. Bezrukov. First passage, looping, and direct transition in expanding and narrowing tubes: Effects of the entropy potential. *The Journal of Chemical Physics*, 147(13):134104, 2017. [15](#)
- [BDB17c] Alexander M. Berezhkovskii, Leonardo Dagdug, and Sergey M. Bezrukov. Mean direct-transit and looping times as functions of the potential shape. *The Journal of Physical Chemistry B*, 121(21):5455–5460, 2017. PMID: 28475835. [1](#), [16](#)
- [BDB17d] Alexander M. Berezhkovskii, Leonardo Dagdug, and Sergey M. Bezrukov. A new insight into diffusional escape from a biased cylindrical trap. *The Journal of chemical physics*, 147 10:104103, 2017. [69](#), [70](#), [71](#), [72](#), [74](#), [76](#), [77](#), [95](#), [98](#), [100](#), [104](#), [107](#), [110](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [BHM⁺09] P. Sekhar Burada, Peter Hänggi, Fabio Marchesoni, Gerhard Schmid, and Peter Talkner. Diffusion in confined geometries. *ChemPhysChem*, 10(1):45–54, 2009. [1](#)
- [BPB03] A. M. Berezhkovskii, M. A. Pustovoit, and S. M. Bezrukov. Channel-facilitated membrane transport: Average lifetimes in the channel. *Journal of Chemical Physics*, 119(7):3943–3951, 2003. [25](#)
- [Cal13] Inti Pineda Calderón. *Sobre la difusión en sistemas confinados: una aproximación al estudio de la difusión en canales*. PhD thesis, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, <http://tesiuami.itz.uam.mx>, 11 2013. [1](#)
- [can] Canvasjs.- beautiful html5 charts + graphs. (accessed: 25.10.2025). [61](#)
- [DB93] J.D. Dwyer and V.A. Bloomfield. Brownian dynamics simulations of probe and self-diffusion in concentrated protein and dna solutions. *Biophysical Journal*, 65(5):1810 – 1816, 1993. [2](#)
- [DDM⁺03] Frédéric Daumas, Nicolas Destainville, Claire Millot, André Lopez, David Dean, and Laurence Salomé. Confined diffusion without fences of a g-protein-coupled receptor as revealed by single particle tracking. *Biophysical Journal*, 84(1):356 – 366, 2003. [9](#)
- [DPPG24] L. Dagdug, J. Peña, and I. Pompa-García. *Diffusion Under Confinement: A Journey Through Counterintuition*. Springer International Publishing, 2024. [6](#), [9](#)
- [DRM14] Jon Duckett, Gilles Ruppert, and Jack Moore. *JavaScript and jQuery : interactive front-end web development*. 2014. [61](#)
- [Fou] JS Foundation. jquery. (accessed: 25.10.2025). [61](#)
- [GCSDPV10] Leopoldo García-Colín Scherer, Leonardo Dagdug, Michel Picquart, and Edgar Vázquez. *Introducción a la física biológica*. El Colegio Nacional, 2010. [12](#), [38](#)
- [Gro] Khronos Group. Opengl - the industry standard for high performance graphics. (accessed: 25.10.2025). [61](#)
- [KBH⁺15] Kawa, Dirk Burkhardt, David Hoppe, Mariam Nazemi, and JÃ¶rn Kohlhammer. Web-based evaluation of information visualization. *Procedia Manufacturing*, 3:5527–5534, 12 2015. [58](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [KBK⁺08] Rex A. Kerr, Thomas M. Bartol, Boris Kaminsky, Markus Dittrich, Jen-Chien Jack Chang, Scott B. Baden, Terrence J. Sejnowski, and Joel R. Stiles. Fast monte carlo simulation methods for biological reaction-diffusion systems in solution and on surfaces. *SIAM J. Sci. Comput.*, 30(6):3126–3149, October 2008. [31](#)
- [KMOS17] Abdullah Kurkcu, Fabio Miranda, Kaan Ozbay, and Claudio T. Silva. Data visualization tool for monitoring transit operation and performance. In *2017 5th IEEE International Conference on Models and Technologies for Intelligent Transportation Systems (MT-ITS)*, pages 598–603, 2017. [58](#)
- [KP06] P. Kalinay and J. K. Percus. Corrections to the fick-jacobs equation. *Phys. Rev. E*, 74:041203, Oct 2006. [16](#), [22](#)
- [KPK01] Thorsten Kues, Reiner Peters, and Ulrich Kubitscheck. Visualization and tracking of single protein molecules in the cell nucleus. *Biophysical Journal*, 80(6):2954 – 2967, 2001. [9](#)
- [LFT⁺20] Qibin Liu, Xuemin Fang, Shinichi Tokuno, Ungil Chung, Xianxiang Chen, Xiyong Dai, Xiaoyu Liu, Feng Xu, Bing Wang, and Peng Peng. A web visualization tool using t cell subsets as the predictor to evaluate covid-19 patient’s severity. *PLOS ONE*, 15(9):1–12, 09 2020. [58](#)
- [OBM18] Rok Oblak, Ciril Bohak, and Matija Marolt. Web-based vascular flow simulation visualization with lossy data compression for fast transmission. In Lucio Tommaso De Paolis and Patrick Bourdot, editors, *Augmented Reality, Virtual Reality, and Computer Graphics*, pages 3–17, Cham, 2018. Springer International Publishing. [58](#)
- [OTc] Mark Otto, Jacob Thornton, and Bootstrap contributors. Bootstrap · the most popular html, css, and js library in the world. [61](#)
- [PSML20] Antonis Protopsaltis, Panagiotis Sarigiannidis, Dimitrios Margouidakis, and Anastasios Lytos. Data visualization in internet of things: Tools, methodologies, and challenges. 08 2020. [58](#)
- [RR01] D. Reguera and J. M. Rubí. Kinetic equations for diffusion in the presence of entropic barriers. *Phys. Rev. E*, 64:061106, Nov 2001. [16](#), [22](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [Sax93a] M.J. Saxton. Lateral diffusion in an archipelago. dependence on tracer size. *Biophysical Journal*, 64(4):1053 – 1062, 1993. [2](#)
- [Sax93b] M.J. Saxton. Lateral diffusion in an archipelago. single-particle diffusion. *Biophysical Journal*, 64(6):1766 – 1780, 1993. [9](#)
- [SBD⁺21] David Sehnal, Sebastian Bitrich, Mandar Deshpande, Radka Svo-
bodová, Karel Berka, Václav Bazgier, Sameer Velankar, Stephen K
Burley, Jaroslav Koča, and Alexander S Rose. Mol* Viewer: mo-
dern web app for 3D visualization and analysis of large biomole-
cular structures. *Nucleic Acids Research*, 49(W1):W431–W437, 05
2021. [58](#)
- [SVHB⁺96] J R Stiles, D Van Helden, T M Bartol, E E Salpeter, and M M
Salpeter. Miniature endplate current rise times less than 100 mi-
croseconds from improved dual recordings can be modeled with
passive acetylcholine diffusion from a synaptic vesicle. *Proceedings
of the National Academy of Sciences*, 93(12):5747–5752, 1996. [31](#)
- [SYWP06] Chris Sanford, Matthew L.K. Yip, Carl White, and John Parkin-
son. Cell++ Simulating biochemical pathways. *Bioinformatics*,
22(23):2918–2925, 10 2006. [30](#), [31](#), [32](#)
- [thr] Three.js – javascript 3d library. (accessed: 25.10.2025). [61](#)
- [VDBB16] R. Verdel, L. Dagdug, A. M. Berezhkovskii, and S. M. Bezrukov.
Unbiased diffusion in two-dimensional channels with corrugated
walls. *J Chem Phys*, 144(8):084106, Feb 2016. [22](#)
- [web] Webgl overview - the khronos group inc. (accessed: 25.10.2025).
[61](#)
- [WFW⁺20] Jagoda Walny, Christian Frisson, Mieka West, Doris Kosminsky,
Søren Knudsen, Sheelagh Carpendale, and Wesley Willett. Data
changes everything: Challenges and opportunities in data visua-
lization design handoff. *IEEE Transactions on Visualization and
Computer Graphics*, 26(1):12–22, 2020. [58](#)
- [Wis13] Jaime Wisniak. Thomas graham. ii. contributions to diffusion of
gases and liquids, colloids, dialysis, and osmosis. *Educación Quími-
ca*, 24:506 – 515, 2013. [1](#)
- [Zwa92] Robert Zwanzig. Diffusion past an entropy barrier. *The Journal
of Physical Chemistry*, 96(10):3926–3930, 1992. [21](#)

BIBLIOGRAFÍA
