

# MODELADO MESOSCOPICO DE SUSPENSIONES VIRALES

## VII ENCUENTRO DE EGRESADOS DE LA ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA UNSA-2022

Karen Gonzales Flores  
Asesor: Dr. Francisco Alarcón Oseguera  
Co-asesor: Dr. Ramón Castañeda Priego  
División de Ciencias e Ingenierías  
Departamento de Física  
Universidad de Guanajuato  
k.gonzalesflores@ugto.mx  
kgonzales@unsa.edu.pe

Nov 9 , 2022

UNIVERSIDAD DE  
GUANAJUATO



# Tabla de Contenidos

- 1 Virología Física
- 2 Dinámica de Partículas Disipativas
- 3 Modelamiento mesoscópico
- 4 Bibliografía

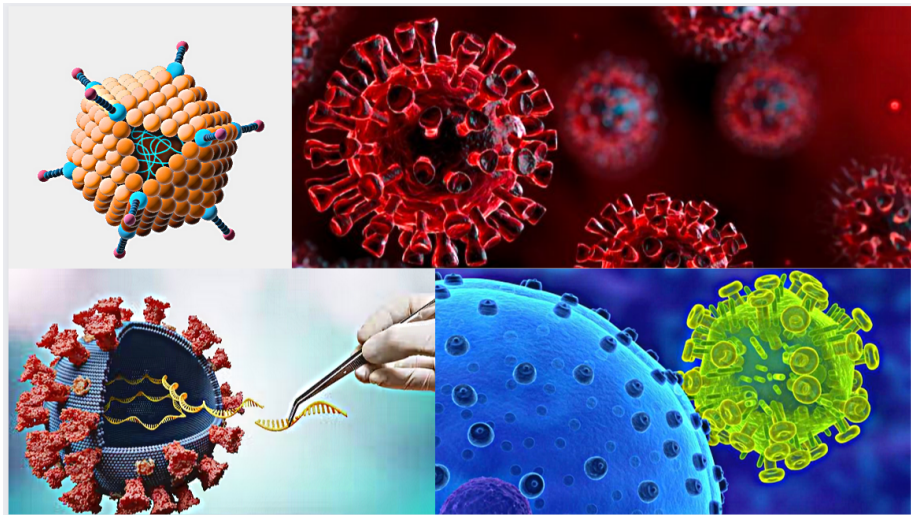


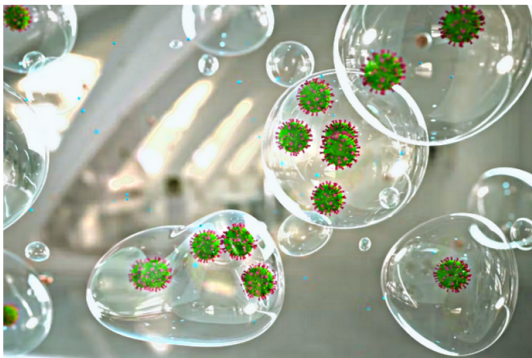
# Tabla de Contenidos

- 1 Virología Física
- 2 Dinámica de Partículas Disipativas
- 3 Modelamiento mesoscópico
- 4 Bibliografía

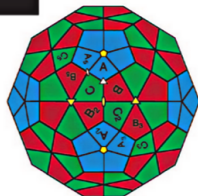
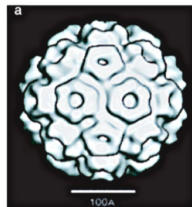


# Virología Física

DE  
O



Representación del transporte viral del SARS-CoV-2 en el aire a través de gotitas de saliva [9].



a) Reconstrucción por Criomicroscopía electrónica (Cryo-TEM; por sus siglas en inglés) de la cápside viral icosaédrica del virus del moteado clorótico del guisante (CCMV; por sus siglas en inglés) b) Colocación de tres subunidades con sitios no equivalentes de simetría: A, B y C, en un icosaédro truncado, Imágenes tomadas de la [1].



# Tabla de Contenidos

- 1 Virología Física
- 2 Dinámica de Partículas Disipativas**
- 3 Modelamiento mesoscópico
- 4 Bibliografía



# Dinámica de Partículas Disipativas

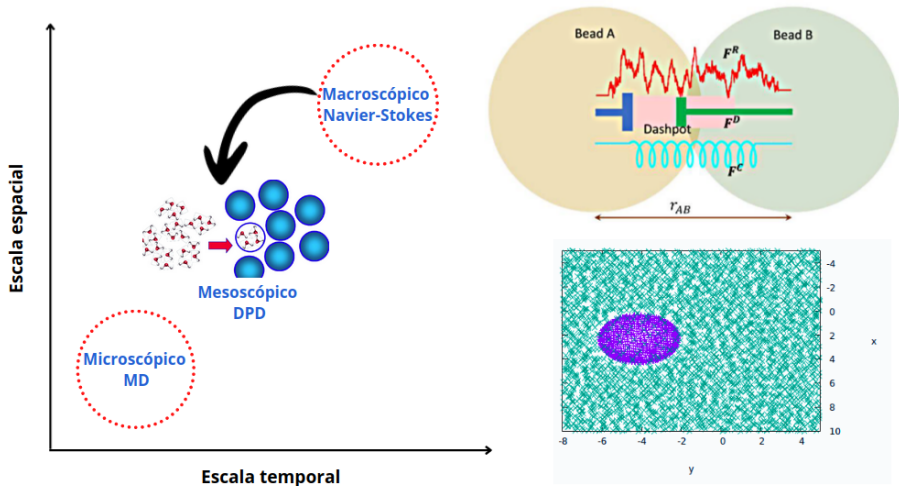
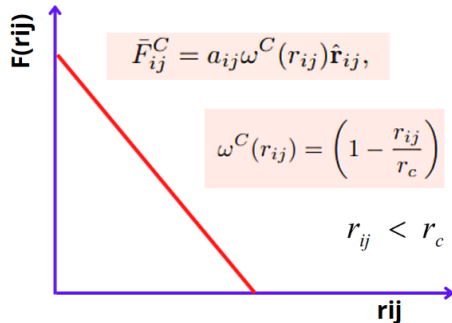
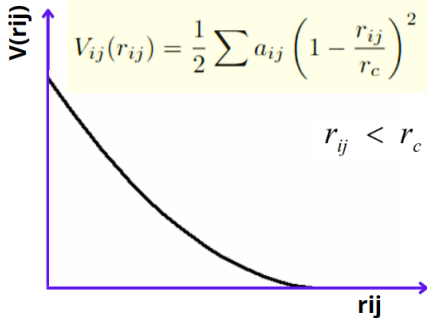
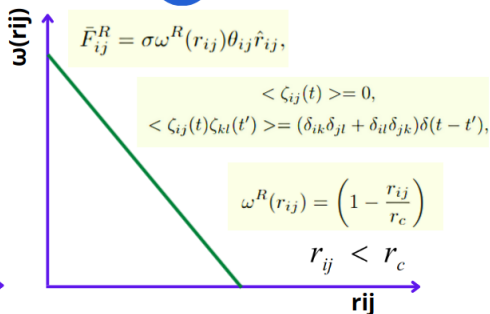
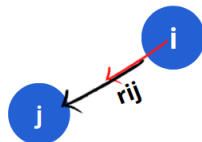
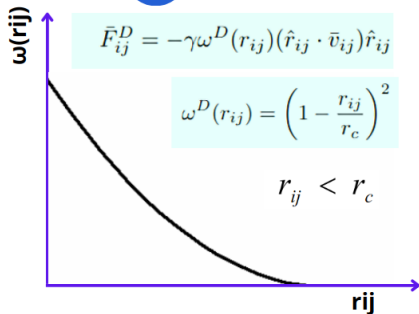
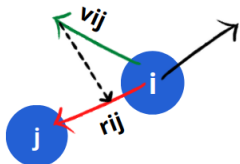


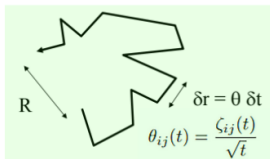
Figure 1: Esquema explicativo del método DPD.







$$d\bar{v}_i = \left[ \sum_{j \neq i} \bar{F}_{ij}^C(r_{ij}) + \sum_{j \neq i} -\gamma \omega_D(r_{ij}) (\hat{r}_{ij} \cdot \bar{v}_{ij}) \hat{r}_{ij} \right] dt + \sum_{j \neq i} \sigma \omega_R(r_{ij}) \hat{r}_{ij} \zeta_{ij} / \sqrt{\delta t}.$$



Groot R. Introduction to Dissipative Particle Dynamics. Unilever Research Vlaardingen, recuperado de [https://www.eng.uc.edu/~beaucag/Classes/AdvancedMaterialsThermodynamics/Thermodynamics%20and%20Materials%20Modeling/KuppaPapersandTalks/presentation\\_DPD\\_Groot.pdf](https://www.eng.uc.edu/~beaucag/Classes/AdvancedMaterialsThermodynamics/Thermodynamics%20and%20Materials%20Modeling/KuppaPapersandTalks/presentation_DPD_Groot.pdf)

$$\partial_t \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t) = L \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t)$$

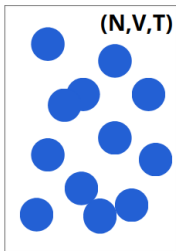
### Ec. de Fokker-Planck

$$\partial_t \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t) = L_C \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t) + L_D \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t)$$

$$L_C \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t) \equiv - \left[ \sum_i \frac{\bar{p}_i}{m} \frac{\partial}{\partial \bar{r}_i} + \sum_{i,j \neq i} \bar{F}_{ij}^C \frac{\partial}{\partial \bar{p}_i} \right] \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t)$$



$$L_D \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t) \equiv \sum_{i,j \neq i} \bar{r}_{ij} \frac{\partial}{\partial \bar{p}_i} \left[ \gamma \omega_D(r_{ij}) (\hat{r}_{ij} \cdot \bar{v}_{ij}) + \frac{\sigma^2}{2} \omega_R^2(r_{ij}) \hat{r}_{ij} \left( \frac{\partial}{\partial \bar{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \bar{p}_j} \right) \right] \rho(\bar{r}_i, \bar{p}_i; t)$$



$$\rho_{eq}(\bar{r}_i, \bar{p}_i)$$

$$\partial_t \rho = 0$$

$$L_C \rho_{eq} = 0$$

$$L_D \rho_{eq} = 0$$

$$\rho_{eq}(\bar{r}_i, \bar{p}_i) = \frac{1}{Z} \exp[-\bar{H}(\bar{r}_{ij}, \bar{p}_{ij})/k_B T]$$

$$\rho_{eq}(\bar{r}_i, \bar{p}_i) = \frac{1}{Z} \exp[-(\sum_i p_i^2 + V(r_{ij}))/k_B T]$$

**Termostato DPD - Teorema de fluctuación-disipación**

$$\omega_R(r_{ij}) = \omega_D^{1/2}(r_{ij}),$$

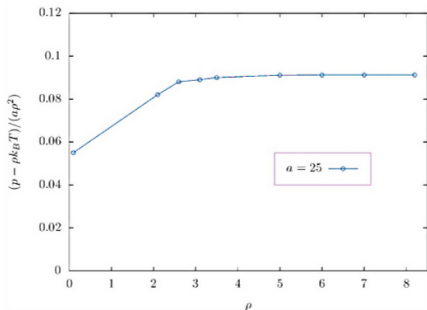
$$\sigma = (2k_B T \gamma)^{1/2},$$



$$\frac{1}{2}(\sigma\omega_R(r_{ij}))^2 = \gamma\omega_D(r_{ij})k_B T$$

Energía cinética por  
unidad de tiempo

Disipación de energía cinética  
por unidad de tiempo



$$\kappa^{-1} = \frac{1}{nk_B T \kappa_T} = \frac{1}{k_B T} \left( \frac{\partial p}{\partial n} \right)_T$$

$$\begin{aligned} p &= \rho k_B T + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{j>i} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{f}_i \right\rangle \\ &= \rho k_B T + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{j>i} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{F}_{ij}^C \right\rangle \\ &= \rho k_B T + \frac{2\pi}{3} \rho^2 \int_0^1 r f(r) g(r) r^2 dr \end{aligned}$$

$$p = \rho k_B T + \alpha a \rho^2 (\alpha = 0.101 \pm 0.001)$$

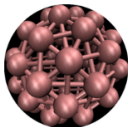
# Tabla de Contenidos

- 1 Virología Física
- 2 Dinámica de Partículas Disipativas
- 3 Modelamiento mesoscópico**
- 4 Bibliografía

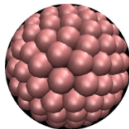


# Modelamiento mesoscópico

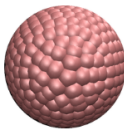
Model 1



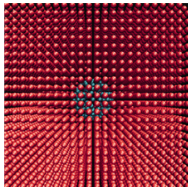
Model 2



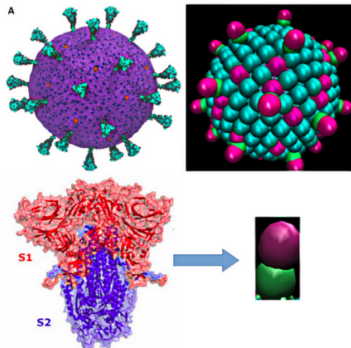
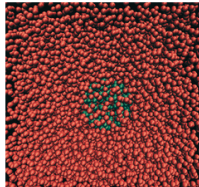
Model 3



A

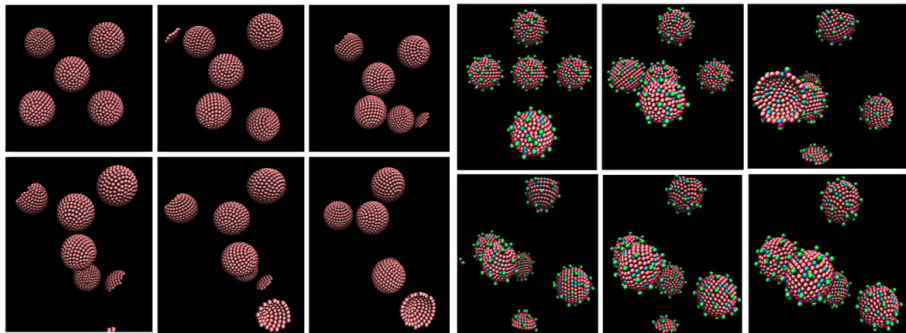


B



Modelo multiescala de grano grueso del virión de SARS-CoV-2 tomado de la ref. (31) (izquierda). Modelo detallado construido con partículas DPD (derecha), donde las partículas de color morado, celeste, verde y rosa representan la proteína E, la proteína M, la subunidad S2 y la subunidad S1, respectivamente. Modelo DPD visualizado por VMD. 37

DE  
D



## Esquema de integración DPD-VV/LAMMPS

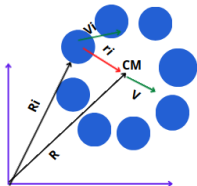
$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \mathbf{f}_i(t),$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \lambda \Delta t \mathbf{f}_i(t),$$

$$\mathbf{f}_i(t + \Delta t) = \mathbf{f}_i(\mathbf{r}(t + \Delta t), \tilde{\mathbf{v}}(t + \Delta t)),$$

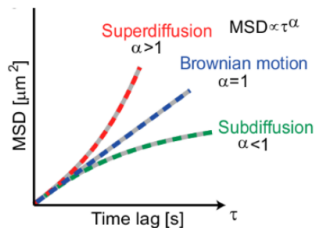
$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t (\mathbf{f}_i(t) + \mathbf{f}_i(t + \Delta t)).$$

## Momento Angular/¿Difusión Rotacional?



$$\bar{L} = \sum_i (\bar{R}_i \times m_i \bar{V}_i)$$

## Desplazamiento cuadrático medio



$$\langle \Delta \mathbf{r}^2 \rangle = \langle [\mathbf{r}_i(t + t_0) - \mathbf{r}_i(t_0)]^2 \rangle,$$

Se muestran las curvas de desplazamiento cuadrático medio (MSD) para subdifusión, superdifusión y difusión browniana [3].





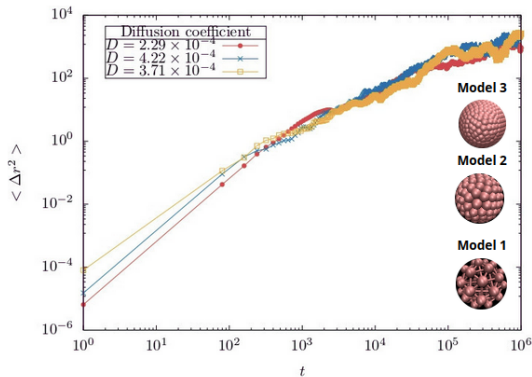
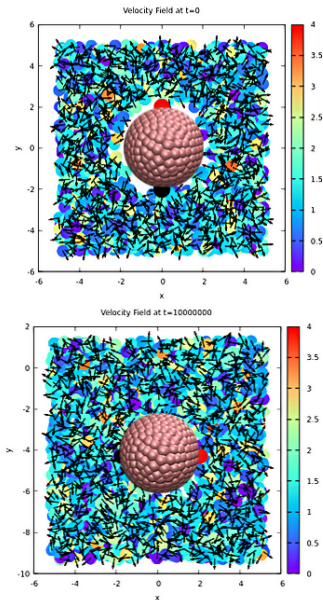


Fig.2 Desplazamiento cuadrático medio vs tiempo en escala logarítmica para el modelo 1(amarillo), para el modelo 2 (azul) y para el modelo 3 (rojo). en una caja con longitud de  $45rc$ , donde  $a_{ii}=a_{ij}=75$ . Para tiempos largos ( $10^6$ ) no hay diferencia significativa en la difusión.





# Tabla de Contenidos

- 1 Virología Física
- 2 Dinámica de Partículas Disipativas
- 3 Modelamiento mesoscópico
- 4 Bibliografía**



# Bibliografía

- [1] T. Dbouk, and D. Drikakis, Fluid dynamics and epidemiology: Seasonality and transmission dynamics, *Phys. Fluids* 33, 021901 (2021).
- [2] S. Olmsted, J. Padgett, A. Yudin, K. Whaley, T. Moench, and R. Cone, Diffusion of Macromolecules and Virus-Like Particles in Human Cervical Mucus, *Biophysical Journal*, 8, 1930–1937, (2001).
- [3] N. Granik, L. Weiss, E. Nehme, M. Levin, M. Chein, E. Perlson, Y. Roichman and Y. Shechtman, Single-Particle Diffusion Characterization by Deep Learning, *Biophysical Society.*, 117, 1–8, (2019).
- [4] P. Groot and P. Warren, Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation, *J. Chem. Phys.*, Vol. 107, pp. 4423, (1997).
- [5] P. Español and P. Warren, Statistical Mechanics of Dissipative Particle Dynamics, *Europhys. Lett.*, Vol. 30 (4), pp. 191-196, (1995).
- [6] S. Albaladejo, M. Marqués, and J. Sáenz, Light control of silver nanoparticle's diffusion, *OPTICS EXPRESS*, 19 (12), 11472, (2011).
- [7] A. Yu, A. Pak, P. He, V. Monje, L. Casalino, Z. Gaieb, A. Dommer, R. Amaro, and G. Voth, A Multiscale Coarse-Grained Model of the SARS-CoV-2 Virion, *Biophysical Journal*, 120, 1–8 (2021).
- [8] W. Roos, R. Bruinsma and G. Wuite, Physical virology, *Nat. Rev. Phys.*, 6, 733-743 (2010).

