



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
ESCUELA DE POSTGRADO

**DIFUSIÓN DE SUSPENSIONES PASIVAS Y ACTIVAS A BAJO
NÚMERO DE REYNOLDS**

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE

DOCTORA EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA, MENCIÓN
FLUIDODINÁMICA

FRANCISCA CATALINA GUZMÁN LASTRA

PROFESOR GUÍA:
DR. RODRIGO SOTO BERTRÁN

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
DR. ERIC CLEMENT
DRA. MARÍA LUISA CORDERO GARAYAR
DR. CHRISTIAN IHLE BASCUÑÁN

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por CONICYT

SANTIAGO DE CHILE
DICIEMBRE 2012

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer primero que todo al Profesor Rodrigo Soto, quien por casualidad es también mi profesor guía. Quiero decirle que sin su apoyo incondicional durante mi doctorado nada de esto hubiese sido posible, muchas gracias por sus consejos, por siempre apoyarme, gracias por su infinita paciencia, por nunca nunca enojarse, sino más bien siempre darme ánimo, gracias por entregarme sus conocimientos y por volver a encantarme con la física. En segundo lugar quiero agradecer al departamento de Física de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas en general, profesores, alumnos y personal por ser tan buenos compañeros y personas, quienes me recibieron muy bien. Por otro lado quiero agradecer a los profesores que forman parte de mi claustro, en especial a María Luisa Cordero, y a los profesores que son parte del Doctorado en Fluidodinámica, en especial al profesor Yarko Niño y a Aldo Tamburrino, quienes siempre estuvieron muy dispuestos a ayudar. También a mis compañeros Federico Flores y Cristián Godoy dos amigos y colegas para la vida. En tercer lugar quiero agradecer al profesor Eric Clement y a Gastón Miño quienes me acogieron muy bien en París y siempre tuvieron muy buena disposición para resolver cualquier duda o requerimiento si se los pedía. Por último quiero agradecer a mis amigos y compañeros en esta travesía llamada Licenciatura-Doctorado, mis amigas de la vida, a Jocelyn en especial, a Alejandro Martínez quien sin dudas fue mi cable a tierra en este proceso siempre apoyándome y guiándome a través de la física. Y como esta tesis marca el final de una etapa quiero agradecer a quien fue mi amigo-compañero-amante durante toda esta loca carrera por las ciencias Nicolás Araya quien siempre estuvo a mi lado a pesar de que mi cabeza divagaba por otros planos y quien me volvió a tomar de la mano y a alentar al final de este proceso.

No puedo dejar fuera a mi familia, mi mamá y mis hermanos en especial a mi hijo hermoso Gaspar Martínez, quien es lejos lo mejor que me ha pasado en la vida te amo.

Agradezco a CONICYT por su apoyo financiero durante el desarrollo de mi doctorado a través de la beca de doctorado nacional y asistencia a congresos en el extranjero. A la Universidad de Chile por la beca de pasantía en el extranjero. A los proyectos FONDECYT 1100100, Anillo ACT 127 y ECOS-Conicyt C07E07 y C11E04. Además, se usaron los cluster de Departamento de Física (CIMAT-SCAT) y del Centro de Modelamiento Matemático CMM (NLHPC-ECM-02), ambos de la Universidad de Chile.

Índice

1. Introducción	1
2. Fluidos a bajo número de Reynolds	6
2.1. Ecuaciones de Stokes	6
2.2. Propiedades de las ecuaciones de Stokes	9
2.2.1. Energía mínima	9
2.2.2. Reversibilidad	10
2.2.3. Teorema de la reciprocidad	10
2.2.4. La función de Green de un flujo de Stokes	12
2.3. Fuerza y torque para una partícula en un flujo de Stokes	12
2.4. Partícula rígida en un flujo de Stokes	13
2.4.1. Expansión multipolar sobre una partícula rígida	14
2.4.2. Esfera en un campo de corte lineal con rotación	16
2.4.3. Esfera en equilibrio mecánico	17
2.4.4. Flujo de Couette plano	18
3. Suspensiones Pasivas	19
3.1. Resumen	19
3.2. Introducción	20
3.3. Interacciones Hidrodinámicas	21
3.4. Ecuaciones de movimiento	23
3.5. Método de simulación	25
3.5.1. Condición de borde de Lees-Edwards	28
3.5.2. Método predictor-corrector	28
3.6. Resultados	29
3.6.1. Desplazamiento cuadrático medio	29
3.6.2. Régimen I: Crecimiento inicial	31
3.6.3. Régimen II: el plateau	32

3.6.4.	Régimen III: Primer régimen difusivo	35
3.6.5.	Régimen IV: subdifusión	36
3.6.6.	Régimen V: segundo movimiento difusivo	40
3.6.7.	Validación de resultados	40
3.7.	Conclusiones	41
4.	Suspensiones Activas	43
4.1.	Resumen	43
4.2.	Introducción	44
4.3.	Teorema de la almeja	46
4.4.	Modelo de bacterias	47
4.4.1.	Nadador tipo cascabel	47
4.5.	Ecuaciones escritas desde el centro geométrico	49
4.6.	Ecuaciones escritas desde el centro hidrodinámico	50
4.7.	Interacciones Hidrodinámicas	56
4.8.	Ecuaciones de movimiento	58
4.9.	Simulación y Resultados	62
4.9.1.	Suspensión sin cizalle	62
4.9.2.	Suspensión con cizalle	68
4.10.	Conclusiones	74
5.	Bacteria nadando en un medio fluctuante.	75
5.1.	Resumen	75
5.2.	Introducción	75
5.3.	Dinámica determinista del nadador.	77
5.4.	Flujo oscilatorio ruidoso	80
5.5.	Métodos numéricos	82
5.6.	Resultados	83
5.6.1.	Vector director	83
5.6.2.	Vector desplazamiento	85
5.7.	Conclusiones.	88
6.	Conclusiones	90
7.	Publicaciones	93
A.	Apéndice	95
	Referencias	97

RESUMEN

En esta tesis se presenta el estudio de suspensiones pasivas de esferas micrométricas y suspensiones activas de bacterias tipo *Escherichia coli* sometidas a un cizalle simple en el límite de bajo número de Reynolds. Se estudian, por un lado, la autodifusión inducida por el cizalle en suspensiones pasivas de esferas, y por otro, en suspensiones mixtas de esferas pasivas y bacterias para distintas concentraciones de bacterias y esferas. Para modelar las bacterias se utilizó un modelo de bacteria tipo cascabel en las suspensiones y para modelar a una bacteria sometida a fluctuaciones se utilizó una bacteria infinitamente elongada. El trabajo desarrollado consiste en un estudio teórico para el modelo de las bacterias y las ecuaciones de la hidrodinámica y por otro lado un trabajo numérico para realizar las simulaciones necesarias para el desarrollo de la tesis.

Los resultados, en el caso de una suspensión de esferas pasivas sometidas a un cizalle simple, muestran un proceso subdifusivo bastante complejo y extenso en donde las esferas experimentan distintas transiciones hasta llegar al régimen difusivo, estas transiciones toman cada vez más tiempo a medida que la concentración volumétrica de partículas disminuye. La difusividad varía como el cuadrado de la concentración lo que es acorde a los resultados encontrados para interacciones repulsivas de corto alcance. Además encontramos que el comportamiento subdifusivo es perdido cuando se agregan bacterias en la suspensión, lo que permite que el proceso difusivo se logre más rápido y sea mayor en el caso de una suspensión mixta. La difusividad de las bacterias disminuye a medida que se aumenta la concentración de esferas y la difusividad de las esferas aumenta a medida que se agregan bacterias en el sistema. Por último, en la última sección se presentan los resultados para el caso en que la suspensión de bacterias es reemplazada como ruido ambiente en una suspensión y se estudia el comportamiento de una bacteria sometida a ruido multiplicativo en presencia de un cizalle simple oscilante. En este caso se observa que la bacteria tiende a desplazarse preferentemente en la dirección de vorticidad del sistema mostrando una variación en la intensidad de este desplazamiento con la intensidad de ruido aplicado, fenómeno conocido como resonancia estocástica.

Capítulo 1

Introducción

La dinámica de fluidos es un tema que abarca muchas áreas de las ciencias, desde las ciencias de la ingeniería, pasando por física, matemática, química, biología y otras ramas de estas ciencias. Las ecuaciones que describen el movimiento de un fluido son las llamadas ecuaciones de Navier-Stokes (ver con más detalle en el capítulo 2). Estas ecuaciones se caracterizan por ser no lineales y por ser difíciles de resolver analíticamente. Escalando las ecuaciones de Navier-Stokes es posible escribirlas en función de un adimensional llamado número de Reynolds Re , adimensional que permite movernos en distintos regímenes dinámicos o de flujo, dependiendo del balance entre fuerzas de inercia y viscosas. Así para número de Reynolds muy grandes $Re \gg 1$ la dinámica de los fluidos es turbulenta y caótica, los efectos inerciales dominan el movimiento del fluido. En este régimen encontramos el movimiento de las olas, de un río, la dinámica atmosférica, por nombrar algunos. En cambio cuando un fluido se mueve con número de Reynolds más pequeño $100 > Re > 1$, la dinámica del fluido puede tener estados estacionarios o bien tener un grado de coordinación, este régimen es conocido como laminar. El régimen que estudiaremos a lo largo de este trabajo de tesis es el dado por un número de Reynolds igual a cero $Re = 0$. En este caso las ecuaciones de Navier-Stokes son simplificadas a las ecuaciones lineales de Stokes. En este régimen el movimiento del fluido está dominado por los efectos viscosos y no por los inerciales, en este régimen encontramos la dinámica de flujos viscosos, fluidos no-Newtonianos, nados de bacterias, suspensiones de partículas, gotas, burbujas, problemas de sedimentación y problemas de microfluidos.

Durante las últimas décadas se ha generado un gran interés por entender las suspensiones y su comportamiento como un fluido efectivo, en particular se ha sumado interés en las propiedades de transporte de estas suspensiones y en cómo afectan al medio. Las suspensiones pasivas, en la industria, son usadas comúnmente para

transportar grandes cantidades de materiales particulados por ejemplo, suspensiones de arena, celulosa en la fabricación de papel, entre otros. Además las suspensiones son importantes en los procesos de manufacturación de muchos productos como, la cerámica, pinturas, maquillajes y comida. Debido a la complejidad de estos sistemas, es que se hace fundamental entenderlos desde su nivel más fundamental de manera de controlar efectivamente las propiedades de las suspensiones durante estos procesos. El comportamiento de suspensiones de esferas duras ha sido muy estudiada, desde el punto de vista macroscópico, el interés se centra en entender la reología de estos sistemas y sus procesos difusivos y, desde el punto de vista microscópico, o al nivel de la partícula estos procesos pueden estar relacionados con fuerzas o interacciones de origen hidrodinámico, browniano o inter-partículas. Entender la relación entre estos fenómenos microscópicos y macroscópicos es lo que mueve a los investigadores.

En el caso de las suspensiones de coloides, la difusión browniana es el principal mecanismo en las propiedades de transporte en estas suspensiones. En este campo los estudios se centran en suspensiones densas, ya que dependiendo de la fracción volumétrica de partículas es posible observar distintos regímenes en la suspensión, como cambios en la viscosidad o bien en la difusividad de las partículas [13]. Los efectos térmicos decrecen rápidamente al aumentar el tamaño de las partículas. Es así, que para las partículas no-coloidales ($\geq 1\mu\text{m}$) la difusión browniana es despreciable, pero no así la difusión inducida por el flujo en el que se encuentran inmersas, si el flujo se detiene, el proceso difusivo también lo hará instantáneamente, este proceso es conocido como difusión inducida por el cizalle o bien difusión hidrodinámica.

En este proceso difusivo los efectos inerciales o térmicos no tienen importancia. En principio, sólo la presencia de más de dos vecinos es suficiente para desencadenar la difusión de las partículas. Un simple escalamiento puede ser el argumento suficiente para explicar porque sólo con aumentar el tamaño de la partícula la difusión auto inducida por el cizalle es importante sólo para las partículas no-coloides.

Si el movimiento de la partícula es difusivo, entonces se cumple que,

$$\langle \Delta \vec{r} \Delta \vec{r} \rangle = 2\mathbf{D}\Delta t \quad (1.1)$$

donde $\Delta \vec{r}$ es el vector desplazamiento de la partícula, Δt es el paso de tiempo y \mathbf{D} es el tensor difusión con dimensiones [$\text{largo}^2/\text{tiempo}$]. La única escala de longitud relevante es el tamaño de la partícula a . La otra escala de longitud importante podría ser el tamaño de la caja L , pero una propiedad de transporte fundamental como la difusión inducida por el cizalle no debería depender de la geometría en la que se encuentra confinada la suspensión. Ahora la única escala de tiempo en el problema, en el caso de un cizalle simple, es $\dot{\gamma}^{-1}$, donde $\dot{\gamma}$ es la tasa de corte del fluido. Utilizando

este escalamiento, es posible escribir de manera adimensional el tensor difusión $\hat{\mathbf{D}}$ quedando,

$$\mathbf{D} = a^2 \dot{\gamma} \hat{\mathbf{D}} \quad (1.2)$$

Luego, el proceso difusivo tiene una dependencia con el cuadrado del tamaño de la partícula lo que la diferencia enormemente los procesos difusivos brownianos, los que vienen dados por la relación de Einstein la que tiene como coeficiente de difusión para una partícula esférica suspendida en un fluido

$$D = \frac{K_B T}{6\pi\eta a} \quad (1.3)$$

donde K_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura absoluta. La ecuación (1.3) nos muestra que la difusión browniana escala inversamente con el tamaño de la partícula, por lo que al aumentar el tamaño de la partícula la difusión browniana se hace despreciable.

Para las suspensiones diluidas no brownianas, en donde las interacciones entre partículas esencialmente involucran a dos (o tres) partículas, los estudios se han concentrado en la difusión en la dirección del gradiente de velocidades en donde se observaron los cambios reológicos en los primeros experimentos realizados por Gadala-Maria & Acrivos y Leighton & Acrivos [1, 2]. Estos cambios en la viscosidad sólo se pueden llegar a entender si estudiamos las interacciones hidrodinámicas que tienen lugar en este régimen. Debido a que las interacciones entre dos partículas son reversibles a bajo número de Reynolds. Se han estudiado distintas formas de romper esta simetría [10, 12, 18]; al romper la simetría en las interacciones hidrodinámicas se desarrolla un proceso difusivo en la dirección de gradiente y de vorticidad de la suspensión.

En décadas recientes, el interés en la dinámica de organismos autopropulsados como bacterias, peces, y pájaros ha crecido enormemente. El interés tiene dos perspectivas. Por un lado, desde la mecánica continua para describir el movimiento de un nadador y sus interacciones con otros nadadores cercanos y desde la física estadística para deducir comportamientos colectivos que emergen debido a sus interacciones mutuas. Los organismos autopropulsados pertenecen a lo que es llamado *materia activa*, en la cual hay un flujo de energía continuo desde algún reservorio para producir movimiento; energía que finalmente es disipada mediante la viscosidad u otras formas parecidas. Desde el punto de vista de la mecánica estadística, este flujo de energía pone la materia activa en condiciones fuera del equilibrio. Un tipo particular de organismos autopropulsados son las bacterias y las algas unicelulares. Considerando su tamaño micrométrico y sus velocidades típicas de propulsión, ellas están en el régimen de bajo número de Reynolds, en el cual los efectos inerciales son despreciables

en comparación con los efectos viscosos. En esta categoría la bacteria *Escherichia coli* (*E. coli*) ha sido intensivamente estudiada, y mucho ya es sabido sobre su genética, procesos biológicos y movilidad [28, 29]. La *E. coli* al moverse naturalmente realiza un movimiento tipo random walk, ya que cada cierto periodo de tiempo se reorienta al azar, proceso conocido como *tumbling*. En este trabajo no nos enfocaremos en este movimiento y asumiremos una bacteria cuya orientación en cierto instante está determinado por lo que pasó en el paso anterior.

El estudio de las suspensiones activas (de bacterias u organismos autopropulsados), se ha concentrado en entender los fenómenos macroscópicos por un lado, como nado colectivo, difusión, cambios en la viscosidad y transporte de energía [4, 5, 35, 40] y por otro estudiar las interacciones bacteria-bacteria. En el volumen, microorganismos como las bacterias crean, en el campo lejano, un campo de velocidades tipo dipolo de fuerzas, de intensidad constante, σ_0 . Esto produce que las bacterias afecten no sólo debido a su actividad a las partículas o bacterias vecinas sino que también las afecte a través del fluido debido a que estas interacciones decaen como $\sim 1/r^2$. El efecto de un flujo externo en las suspensiones de bacterias puede producir cambios en la orientación de las bacterias y éstas inducir cambios en la viscosidad del fluido. De hecho, se ha predicho y observado experimentalmente que los *pushers* $\sigma_0 < 0$, como la *E. coli* (bacterias que nadan empujando el fluido desde la parte posterior de su cuerpo), reducen la viscosidad del fluido, mientras que los *pullers* $\sigma_0 > 0$ (nadadores que empujan el fluido desde su cabeza), como las algas, la aumentan [30–34].

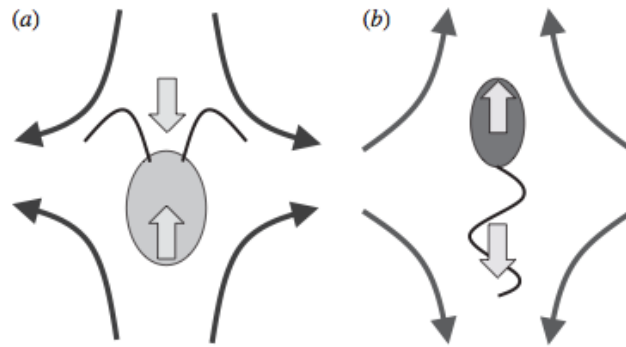


Figura 1.1: En esta figura se presentan los campos de velocidades para dos tipos de bacterias. En (a) una bacteria tipo puller nadando y en b) una bacteria tipo pusher.

Se ha observado además que esta agitación producida por la presencia de bacterias en un fluido, puede afectar la difusión de partículas pasivas o trazadores en las suspensiones mixtas. Wu y Libchaber [35] estudiaron la difusión de trazadores

pasivos en suspensiones de bacterias, en donde encontraron que las partículas pasivas pasaban de tener un comportamiento superdifusivo a uno difusivo en cortos tiempos. Este experimento ha intentado ser reproducido numéricamente utilizando distintos modelos para modelar a las bacterias, lo que he llevado a interpretar esos cambios en la difusión de formas distintas. Como hemos visto la difusión y el estudio de las suspensiones activas, pasivas y mixtas es un campo de estudio en el que aún quedan varias aristas por resolver.

En este trabajo de tesis estudiaremos la dinámica de suspensiones en el régimen de Stokes, en el capítulo 2 presentamos las ecuaciones que describen el movimiento de los cuerpos en el régimen de Stokes, en el capítulo 3 estudiaremos una suspensión pasiva de partículas esféricas neutralmente boyantes sometidas a un cizalle simple. Luego estudiaremos en el capítulo 4 un modelo para una bacteria nadando a $Re = 0$ y la difusión de bacterias y esferas sometidas a un cizalle simple. En el capítulo 5 estudiaremos el caso de una bacteria sometida a un flujo que presenta fluctuaciones en el régimen de Stokes.

Capítulo 2

Fluidos a bajo número de Reynolds

A lo largo de este trabajo de tesis estaremos interesados en el movimiento de una mezcla de partículas activas o pasivas en un fluido. Ambas suspensiones son no brownianas, es decir, las partículas no están sometidas a un desplazamiento aleatorio tipo random walk. Entenderemos por partículas pasivas aquellas que no se pueden auto-propulsar o no tienen movimiento propio, las cuales necesitan de un flujo o un estímulo externo para comenzar a moverse. Por otro lado, entenderemos por partículas activas aquellas que sí poseen un mecanismo de autopropulsión, las cuales por ende no necesitan de un estímulo externo para moverse en el fluido. En muchos casos interesantes las partículas son muy pequeñas o el fluido en el que se encuentran es muy viscoso lo que nos lleva al campo de los *Fluidos a bajo número de Reynolds*. En este contexto es muy común simplificar las ecuaciones no-lineales de *Navier-Stokes* a las ecuaciones lineales de *Stokes*, en donde los efectos inerciales son despreciables con respecto a los efectos viscosos.

2.1. Ecuaciones de Stokes

Consideremos un fluido isotrópico y homogéneo de densidad ρ y viscosidad η , en un volumen V en 3 dimensiones, como se muestra en la figura 2.1. Para cualquier punto \vec{r} en V , consideraremos la velocidad del fluido en ese punto $\vec{u}(\vec{r})$. El fluido es un medio continuo gobernado por las ecuaciones de *Navier-Stokes*.

La ecuación de continuidad para un fluido incompresible es,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \tag{2.1}$$

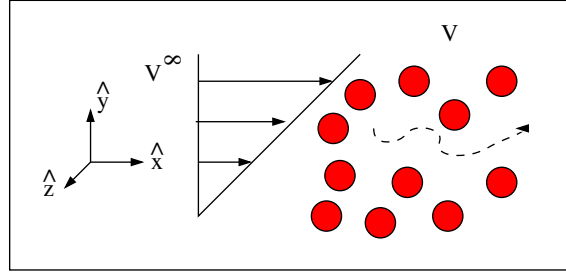


Figura 2.1: En la figura se presenta el sistema de ejes coordenados usados en este trabajo, el perfil de velocidades de un cizalle simple V^∞ y una suspensión de esferas en un volumen V .

y la ecuación de conservación de momentum,

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} \right) = \vec{f} + \vec{\nabla} \cdot \sigma \quad (2.2)$$

en donde \vec{f} es una fuerza externa por unidad de volumen, como la gravedad o fuerzas electromagnéticas y σ es el tensor de esfuerzos, dado en notación de *Einstein* por,

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\eta e_{ij} \quad (2.3)$$

Acá $-p\mathbf{I}$ corresponde a un esfuerzo generado por una fuerza isotrópica normal a la superficie en donde se encuentra confinado el fluido. Esta fuerza es debida al movimiento aleatorio de las partículas de fluido y puede ser descrita por un campo de presión escalar llamado p . El término $2\eta\mathbf{e}$ corresponde al esfuerzo de corte, el que puede ser entendido a partir del experimento de Couette (Richard E. Meyer, 1971). Asumamos un fluido homogéneo e isotrópico ubicado entre dos cilindros concéntricos (ver Fig. 2.2), si el cilindro interno es sometido a un torque fijo que le permite rotar lentamente, mientras que el cilindro externo puede rotar libremente, es observado que después de un corto periodo de tiempo, una parte del momentum del cilindro interno será transmitido al fluido y por lo tanto al cilindro externo, el que comenzará a rotar. Debido a que el borde se mueve tangencialmente al fluido, debe haber un esfuerzo tangencial (llamado esfuerzo de corte) actuando a través del fluido. Después de que pasó una cantidad de tiempo suficiente, el cilindro interno rotará a una velocidad constante y en este punto el sistema completo girará como un sólido rígido. Esta observación nos permite notar que el esfuerzo de corte es despreciable bajo movimiento de un cuerpo rígido. El tensor tasa de deformación viene dado por,

$$\mathbf{e} = \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \vec{u} + \vec{\nabla} \vec{u}^T \right) \quad (2.4)$$

Que es válido para un fluido Newtoniano.

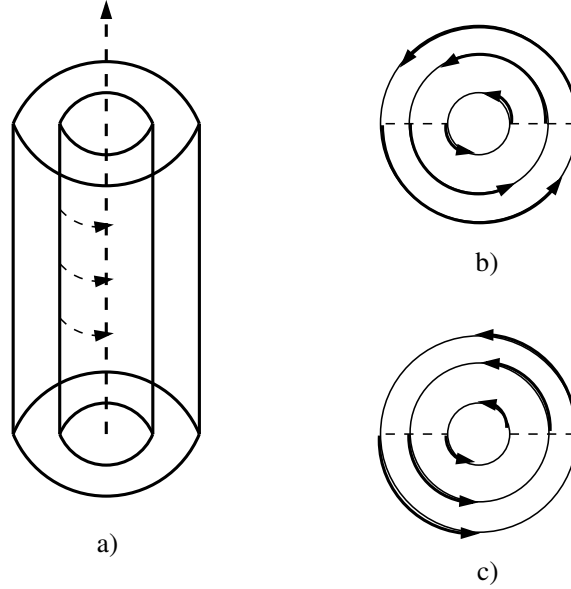


Figura 2.2: *a)* Diagrama del experimento de Couette (vista lateral): El cilindro interior es rotado mientras el cilindro externo es dejado libre para rotar. *b)* Vista desde arriba, cuando un corto tiempo ha pasado, el cilindro externo ha comenzado a rotar debido a la fricción con el fluido. *c)* después de que suficiente tiempo ha pasado, el sistema completo rota como un sólido rígido.

Si reescalamos nuestro problema de manera que $\vec{x}'l_0 = \vec{x}$, $\vec{u}'u_0 = \vec{u}$, $t'l_0/v_0 = t$, y $p'\rho v_0^2 = p$, donde l_0 es una longitud característica y v_0 es la velocidad característica del problema y despreciamos las fuerzas externas, reemplazando en (2.2) y (2.1).

$$\text{Re} \left(\frac{\partial \vec{u}'}{\partial t'} + \vec{u}' \cdot \nabla' \vec{u}' \right) = -\vec{\nabla}' p' + \eta \nabla'^2 \vec{u}' \quad (2.5)$$

$$\vec{\nabla}' \cdot \vec{u}' = 0 \quad (2.6)$$

La importancia de los efectos inerciales comparado con los efectos viscosos en la ecuación (2.5) es medido con el adimensional, llamado *número de Reynolds*,

$$\text{Re} = \frac{\rho v_0 l_0}{\eta} \quad (2.7)$$

La gravedad en este límite es despreciable, debido a que la masa de los cuerpos en general es muy pequeña.

En el caso de las suspensiones, estamos interesados en escalas de longitud pequeñas de aproximadamente $l_0 \sim 1$ [μm]. Como la partícula en suspensión es pequeña la escala de velocidad también es del mismo orden $v_0 \sim 1$ [$\mu\text{m/s}$] y una viscosidad cinemática para el agua a temperatura ambiente $\eta_0/\rho_0 \sim 10^{-6}$ [m^2/s], por lo que el número de Reynolds es aproximadamente $Re \approx 10^{-6}$. En el caso de una bacteria el número de Reynolds es aproximadamente de $Re = 10^{-5}$. Por lo que el lado izquierdo de la ecuación (2.5) al tomar $Re \sim 0$ es despreciable.

Cuando hay una escala de tiempo intrínseca en el problema T , la importancia de la aceleración local comparada con los términos viscosos en la ec. (2.5) es medido con el *número de Stokes*.

$$\text{St} = \frac{l_0^2 \rho}{T \eta} \quad (2.8)$$

La condición $\text{St} \ll 1$ puede ser reescrita como $T \gg l_0^2 \rho / \eta$, donde $l_0^2 \rho / \eta$ es la escala de tiempo característica para el transporte de momentum debido a la difusión viscosa en la escala de las partículas.

Si Re y St son pequeños, podemos despreciar los términos inerciales y de aceleración en las ecuaciones de Navier-Stokes y quedarnos con las ecuaciones de Stokes.

$$-\vec{\nabla}' p' + \eta \nabla'^2 \vec{u}' = 0 \quad (2.9)$$

$$\vec{\nabla}' \cdot \vec{u}' = 0 \quad (2.10)$$

Debido al tamaño micrométrico de las partículas éstas son consideradas no inerciales y por lo tanto se encuentran en equilibrio mecánico, es decir, fuerza total nula $\vec{F}^{\text{Total}} = 0$ y torque total nulo $\vec{\tau}^{\text{Total}} = 0$. Si además las partículas se consideran neutralmente boyantes, esto implicaría que el peso es nulo y por lo tanto la fuerza hidrodinámica sobre la partícula también sería nula.

2.2. Propiedades de las ecuaciones de Stokes

En esta sección presentamos algunas de las propiedades de las ecuaciones de Stokes. Algunas de estas propiedades son consecuencia directa de la linealidad de las ecuaciones.

2.2.1. Energía mínima

Para una geometría y condiciones de borde específicas, la solución de la ecuación de Stokes para dichas condiciones de borde, corresponde a un mínimo en la tasa

de disipación de la energía, en cambio para cualquier otro fluido incompresible que satisfaga las mismas condiciones de borde, la tasa de disipación de energía es mayor [9]. Una consecuencia directa de esta propiedad es la unicidad de la solución de las ecuaciones de Stokes, para una geometría dada y condiciones de borde específicas.

2.2.2. Reversibilidad

La reversibilidad de las soluciones es también una consecuencia de la linealidad de la ecuación de Stokes. Esta propiedad nos permite predecir que una partícula no abandona su línea de flujo, si las condiciones iniciales y de borde del problema no cambian. Supongamos que una partícula se encuentra expuesta a un cizalle de la forma $\vec{v}^\infty = \dot{\gamma}y\hat{x}$ como se muestra en la Fig. (2.3). Nos preguntamos si la partícula se aleja o se acerca a la pared. Si suponemos que la partícula se acerca de la pared con velocidad \vec{U} como se muestra en la parte de arriba de Fig. (2.3) y revertimos el campo de velocidades de manera que $\vec{v}^\infty = -\dot{\gamma}y\hat{x}$ pero invertimos el eje $\hat{x} \rightarrow \hat{x}'$ de manera que $\vec{v}^\infty = \dot{\gamma}y\hat{x}'$ como en la parte inferior de Fig. (2.3), la partícula ahora se mueve con velocidad $-\vec{U}$, por lo que para el mismo problema la partícula ahora se mueve en la dirección contraria (en este caso se aleja a la pared) lo que es una contradicción y nos muestra que la partícula no se aleja ni se acerca a la pared, sino más bien se mueve siempre en su misma línea de flujo y tiene un movimiento reversible.

2.2.3. Teorema de la reciprocidad

Consideremos una región de fluido V encerrada por una superficie S . Supongamos que en esa geometría las velocidades \vec{v} y \vec{v}' satisfacen las ec. de Stokes (2.5) con sus respectivos tensores de esfuerzo σ y σ' . El teorema de la reciprocidad establece que,

$$\oint_S \vec{v} \cdot (\sigma' \cdot \hat{n}) dS = \oint_S \vec{v}' \cdot (\sigma \cdot \hat{n}) dS \quad (2.11)$$

La demostración sigue así,

$$\begin{aligned} u'_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j} &= \frac{\partial}{\partial r_j} (u'_i \sigma_{ij}) - \sigma_{ij} \frac{\partial u'_i}{\partial r_j} \\ &= \frac{\partial}{\partial r_j} (u'_i \sigma_{ij}) - \left(-p\delta_{ij} + \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right) \right) \frac{\partial u'_i}{\partial r_j} \\ &= \frac{\partial}{\partial r_j} (u'_i \sigma_{ij}) - \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right) \frac{\partial u'_i}{\partial r_j} \end{aligned} \quad (2.12)$$

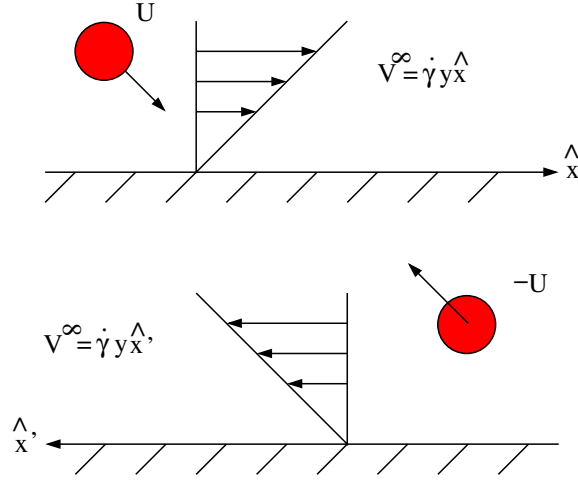


Figura 2.3: Ejemplo de reversibilidad: Arriba una partícula se acerca de la pared al estar expuesta a un cizalle simple. Abajo: la misma partícula se aleja de la pared al hacer un cambio de coordenadas.

Donde hemos usado que $p\delta_{ij}\frac{\partial u'_i}{\partial r_j} = p\frac{\partial u'_i}{\partial r_i} = p\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$. Si realizamos lo mismo pero cambiando las velocidades y el tensor de esfuerzos,

$$u_i \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial r_j} = \frac{\partial}{\partial r_j} (u_i \sigma'_{ij}) - \eta \left(\frac{\partial u'_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial r_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial r_j} \quad (2.13)$$

Sustrayendo (2.13) y (2.13) encontramos,

$$\frac{\partial}{\partial r_j} (u'_i \sigma_{ij} - u_i \sigma'_{ij}) = u'_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j} - u_i \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial r_j} \quad (2.14)$$

Si el flujo \vec{u} y \vec{u}' no contiene puntos singulares, se cumple $\vec{\nabla} \cdot \sigma = 0$, luego

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{u}' \cdot \sigma - \vec{u} \cdot \sigma') = 0 \quad (2.15)$$

Integrando esta ecuación en todo el volumen V y utilizando el teorema de la divergencia, se obtiene (2.11). El teorema de la reciprocidad indica que existe una relación recíproca entre la velocidad de los flujos y los tensores de esfuerzos para dos soluciones distintas de la ecuación de Stokes. Este teorema será utilizado más adelante para encontrar el campo de velocidades de una esfera en un cizalle simple.

2.2.4. La función de Green de un flujo de Stokes

Buscamos la solución para la ecuación de Stokes, para una fuerza puntual ubicada en \vec{x}_0 .

$$-\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{v} + \vec{F} \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) = 0 \quad (2.16)$$

Donde estamos imponiendo la condición de equilibrio mecánico en ausencia de fuerzas externas ($\nabla \cdot \sigma = 0$) y $\delta(\vec{x})$ es la delta de Dirac en tres dimensiones. La ecuación (2.16) tiene por solución para la velocidad y la presión

$$\vec{v}(\vec{x}) = \vec{F} \cdot \frac{\mathbf{G}(\vec{x})}{8\pi\eta} \quad (2.17)$$

$$p(\vec{x}) = \vec{F} \cdot \frac{\vec{P}(\vec{x})}{8\pi\eta} \quad (2.18)$$

donde $\mathbf{G}(\vec{x})$ es el tensor de Oseen, el cual es independiente de las propiedades del fluido y esta dado por,

$$G_{ij}(\vec{x}) \equiv \frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{x_i x_j}{r^3} \quad (2.19)$$

$$(2.20)$$

y $\vec{P}(\vec{x})$ es el campo de presiones del tensor de Oseen, dado por

$$P_j(\vec{x}) = 2\eta \frac{x_j}{r^3} \quad (2.21)$$

La representación de las soluciones de las ec. de Stokes en términos del tensor de Oseen serán muy útiles a lo largo de este trabajo de tesis. Para más detalles en la solución de la ec. (2.16) ver [44].

2.3. Fuerza y torque para una partícula en un flujo de Stokes

En esta sección se presenta la fuerza hidrodinámica \vec{F}^h ejercida por el fluido en movimiento sobre la esfera.

$$\vec{F}^h = \int_{S_p} \sigma \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.22)$$

Para una esfera de radio a que se mantiene fija en un flujo uniforme \vec{U}^∞ , la fuerza \vec{F}^h está dada por,

$$\vec{F}^h = 6\pi\eta a \vec{U}^\infty \quad (2.23)$$

que es conocida como la ley de Stokes, para más detalles de la deducción vea [8, 9]. El torque hidrodinámico resultante de la tracción del fluido en la superficie se escribe,

$$\vec{\tau}^h = \int_{S_p} \vec{x} \times \sigma \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.24)$$

En el caso de una esfera de radio a , con origen en su centro el torque hidrodinámico es [9],

$$\vec{\tau}^h = 8\pi\eta a^3 \vec{\omega}^\infty \quad (2.25)$$

Aquí a corresponde al radio de la esfera, η es la viscosidad del fluido \vec{U}^∞ velocidad del fluido externo, $\vec{\omega}^\infty$ la velocidad angular del fluido externo y σ es el tensor de esfuerzos del fluido.

2.4. Partícula rígida en un flujo de Stokes

A lo largo de este trabajo estaremos interesados en conocer el comportamiento de una o más partículas sometidas a flujos externos. Para comenzar por el caso más simple consideraremos un fluido viscoso que satisface las ecuaciones de Stokes y que tiene velocidad \vec{u}^∞ en ausencia de una partícula. El movimiento del fluido cerca de un punto \vec{r}_0 puede ser descrito por una serie de Taylor,

$$\vec{u}^\infty(\vec{r}) = \vec{u}^\infty(\vec{r}_0) + \vec{\nabla} \vec{u}^\infty(\vec{r}_0) \cdot (\vec{r} - \vec{r}_0) + \dots \quad (2.26)$$

Despreciando términos en ordenes mayores a $\vec{r} - \vec{r}_0$, la velocidad es descrita por una traslación más una variación lineal del flujo. Desplazando \vec{r}_0 al origen, podemos reescribir

$$\vec{u}^\infty(\vec{r}_0) = \vec{U}^\infty$$

el campo lineal es,

$$\vec{\nabla} \vec{u}^\infty = \mathbf{\Omega}^\infty \cdot \vec{r} + \mathbf{E}^\infty \cdot \vec{r} \quad (2.27)$$

Donde hemos usado que,

$$(\vec{\nabla} \vec{u}^\infty)_{ij} = \frac{\partial u_i^\infty}{\partial r_j} \quad (2.28)$$

$$= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i^\infty}{\partial r_j} - \left(\frac{\partial u_i^\infty}{\partial r_j} \right)^T \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i^\infty}{\partial r_j} + \left(\frac{\partial u_i^\infty}{\partial r_j} \right)^T \right] \quad (2.29)$$

$$= \mathbf{\Omega}_{ij}^\infty + \mathbf{E}_{ij}^\infty \quad (2.30)$$

En esta ecuación $\mathbf{\Omega}^\infty$ es el llamado tensor razón de rotación y corresponde a la parte antisimétrica del gradiente de velocidades y \mathbf{E}^∞ el tensor razón de estiramiento

que corresponde a la parte simétrica del gradiente de velocidades. Reemplazando en (2.26), tenemos:

$$\vec{u}^\infty(\vec{r}) = \vec{U}^\infty + \boldsymbol{\Omega}^\infty \cdot \vec{r} + \mathbf{E}^\infty \cdot \vec{r} \quad (2.31)$$

De esta manera hemos escrito el movimiento de un fluido viscoso que satisface las ecuaciones de Stokes, como una aproximación de una traslación más una rotación y un flujo extensional (ver figura 2.4).

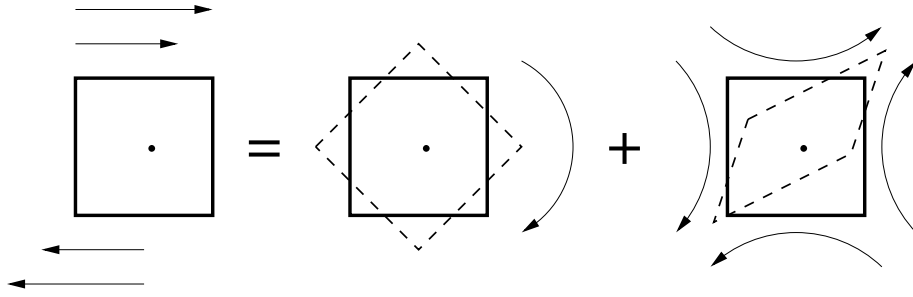


Figura 2.4: Movimiento local alrededor de un punto: Descomposición de un cizalle simple en una traslación mas un flujo rotante y un flujo extensional.

2.4.1. Expansión multipolar sobre una partícula rígida

Escribamos ahora una solución asintótica para un problema parecido al anterior, pero en este caso consideraremos a una partícula rígida, neutralmente boyante, inmersa en un flujo de Stokes. Utilizando el método de las integrales de borde [8] escribiremos la ecuación en el campo lejano, a la partícula, en términos de la primera integral de borde, sobre la superficie de la partícula S_p . Definamos el campo de desviación como la diferencia entre el campo de velocidades con la presencia de la partícula en suspensión \vec{u} y el campo de velocidades en ausencia de ésta \vec{u}^∞ , $\vec{u}^D = \vec{u} - \vec{u}^\infty$. Debido a la linealidad de las ecuaciones de Stokes, las soluciones de estos dos problemas se pueden superponer, de modo que podemos escribir la solución como una suma de ambas soluciones con las condiciones de borde correctas. Por otro lado, sabemos que la solución a la ecuación de Stokes la podemos escribir en términos del tensor de Green \mathbf{G} ,

$$u_i(\vec{r}) = u_i^\infty(\vec{r}) - \frac{1}{8\pi\eta} \int_{S_p} G_{ij}(\vec{r} - \vec{r}') df'_j \quad (2.32)$$

donde \vec{u}^∞ es el campo de velocidades lejos de la partícula (o en ausencia de ésta), \vec{r} es un punto en el fluido, \vec{r}' un punto en la superficie del cuerpo sólido y df es el elemento de fuerza superficial que el fluido le ejerce a la partícula.

Usando la simetría de la función de Green $G(\vec{r}) = G(-\vec{r})$ y expandiendo en torno al centro del cuerpo \vec{r}_0 , con $\vec{r}' = \vec{r}_0 + \vec{\xi}$ y que la única fuerza aplicada sobre la partícula es hidrodinámica, se tiene

$$\begin{aligned}
u_i(\vec{r}) &= u_i^\infty - \frac{1}{8\pi\eta} \int_S G_{ij}(\vec{r} - \vec{r}') df'_j \\
&= u_i^\infty - \frac{1}{8\pi\eta} \int_S [G_{ij}(\vec{x}) - G_{ij,k}(\vec{x})(-\xi_k) + \dots] df'_j \\
&= u_i^\infty - \frac{1}{8\pi\eta} G_{ij}(\vec{x}) \int_S df'_j + \frac{1}{8\pi\eta} G_{ij,k}(\vec{x}) \int_S \xi_k df'_j + \dots \\
&= u_i^\infty - \frac{1}{8\pi\eta} G_{ij}(\vec{x}) F_j + \frac{1}{8\pi\eta} G_{ij,k}(\vec{x}) d_{kj} + \dots
\end{aligned} \tag{2.33}$$

donde $\vec{x} = \vec{r} - \vec{r}_0$. Se tiene así que el campo de velocidades está dado por el campo de velocidades impuesto, más correcciones monopolar de intensidad F_i , dipolar de intensidad d_{ij} y órdenes superiores.

En equilibrio, la partícula tiene fuerza nula y torque nulo. La primera condición implica inmediatamente que $F_i = 0$, mientras que para analizar la segunda debemos usar el resultado en el apéndice A. En efecto, el torque sobre la partícula se escribe como

$$\tau_i = -\epsilon_{ijk} \int_S \xi_j df'_k \tag{2.34}$$

$$= -\epsilon_{ijk} d_{jk} \tag{2.35}$$

$$= -\epsilon_{ijk} d_{jk}^{AS} \tag{2.36}$$

La matriz antisimétrica tiene la misma información que el producto vectorial (ver Apéndice A), imponer que el torque sea nulo es equivalente a imponer que la componente antisimétrica de d_{ij} se anule.

Luego, para una partícula genérica, donde no se han balanceado las fuerzas y torques el campo de velocidades es

$$u_i(\vec{r}) = u_i^\infty - \frac{1}{8\pi\eta} G_{ij}(\vec{x}) F_j + \frac{1}{8\pi\eta} G_{ij,k}(\vec{x}) d_{kj}^S + \frac{1}{8\pi\eta} G_{ij,k}(\vec{x}) d_{kj}^{AS} + \dots \tag{2.37}$$

y si se ha impuesto la condición de equilibrio mecánico, es decir, fuerza nula $\vec{F} = 0$ y toque nulo $\mathbf{d}^{AS} = 0$

$$u_i(\vec{r}) = u_i^\infty + \frac{1}{8\pi\eta} G_{ij,k}(\vec{x}) d_{kj}^S + \dots \tag{2.38}$$

donde $G_{ij,k}$ es el gradiente del tensor de Oseen y está dado por,

$$G_{ij,k} = -\frac{1}{r^3} (\delta_{ij}x_k - \delta_{ik}x_j - \delta_{kj}x_i) - 3\frac{x_ix_jx_k}{r^5} \quad (2.39)$$

2.4.2. Esfera en un campo de corte lineal con rotación

Ahora consideremos una partícula esférica de radio a que se mueve con velocidad lineal \vec{U} y velocidad angular $\vec{\Omega}$ en un fluido que, lejos de la partícula, tiene un campo de velocidades lineal $\vec{u}_i^\infty = E_{ik}^\infty x_k$ que satisface las ecuaciones de Stokes. La ecuación de continuidad implica que para el campo lineal $E_{ii}^\infty = 0$ (es decir, tiene traza nula).

Se define el campo de desviación $\vec{u}^D = \vec{u} - \vec{u}^\infty$, el cual cumple las ecuaciones de Stokes y se anula en infinito y en la superficie de la esfera cumple la condición de borde

$$\vec{u}^D(r = a) = \vec{U} + \vec{\Omega} \times \vec{x} - \vec{u}^\infty(r = a) \quad (2.40)$$

Recordando que $G_{ij}f_j$ es solución de las ecuaciones de Stokes para cualquier \vec{f} , entonces, sus derivadas (manteniendo el índice i libre) también lo serán. De esta forma, por inspección se construye la solución a la ecuación sobre la base de las singularidades anteriores. Se puede demostrar fácilmente que la siguiente combinación lineal cumple adecuadamente las condiciones de borde

$$\begin{aligned} u_i^D &= \frac{3a}{4} \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2\right) G_{ij}U_j \\ &+ \frac{a^3}{6} \left(1 + \frac{a^2}{10} \nabla^2\right) G_{ij,k} (4E_{jk}^\infty + E_{kj}^\infty) \\ &- \frac{a^3}{2} \epsilon_{lkj} G_{ij,k} \Omega_l \end{aligned} \quad (2.41)$$

Este grupo de ecuaciones es conocido como *ley de Faxén*. Agrupando los términos de igual orden en la expansión multipolar se tiene

$$\begin{aligned} u_i^D &= \frac{3a}{4} G_{ij}U_j \\ &+ \frac{a^3}{6} G_{ij,k} (4E_{jk}^\infty + E_{kj}^\infty - 3\epsilon_{lkj}\Omega_l) \\ &+ \frac{a^3}{8} \nabla^2 G_{ij}U_i \\ &+ \frac{a^5}{60} \nabla^2 G_{ij,k} (4E_{jk}^\infty + E_{kj}^\infty) \end{aligned} \quad (2.42)$$

de manera que la esfera genera perturbaciones monopulares, dipolares, cuadrupolares y octupolares en el fluido.

2.4.3. Esfera en equilibrio mecánico

En la sección anterior se mostró que una esfera en equilibrio mecánico cumple que el momento monopolar se anula, como también la componente antisimétrica del momento dipolar. La primera condición implica directamente que $\vec{U} = 0$, es decir, que la esfera se mueve a la misma velocidad local del fluido. Hacemos notar que con esto se anula también el momento cuadrupolar.

Para anular la componente antisimétrica del momento dipolar, se debe cumplir que

$$\begin{aligned}
3\epsilon_{lkj}\Omega_l &= (4E_{jk}^\infty + E_{kj}^\infty)^{AS} \\
&= (4E_{jk}^\infty + E_{kj}^\infty - 4E_{kj}^\infty - E_{jk}^\infty) / 2 \\
&= (3E_{jk}^\infty - 3E_{kj}^\infty) / 2 \\
&= 3E_{jk}^{\infty AS} \\
&= \frac{3}{2}\epsilon_{jkl}e_l \\
&= -\frac{3}{2}\epsilon_{lkj}e_l
\end{aligned} \tag{2.43}$$

donde se usó que el lado izquierdo ya es antisimétrico y se definió el vector \vec{e} como la parte antisimétrica de E^∞ . Se obtiene entonces que la esfera rota a una velocidad angular igual a

$$\Omega_l = -\frac{1}{2}e_l \tag{2.44}$$

Finalmente, volviendo al campo de velocidades de una esfera en equilibrio mecánico, a orden dominante queda la componente simétrica del momento dipolar

$$u_i^D = \frac{5a^3}{6}G_{ij,k}E_{jk}^{\infty S} + \mathcal{O}(r^{-4}) \tag{2.45}$$

tomando la forma explícita de $G_{ij,k}$ y usando que $E^{\infty S}$ es simétrica y de traza nula se llega a

$$u_i^D = -\frac{5a^3}{2}E_{jk}^{\infty S} \frac{x_i x_j x_k}{r^5} + \mathcal{O}(r^{-4}) \tag{2.46}$$

2.4.4. Flujo de Couette plano

Como un ejemplo se puede estudiar el flujo de Couette plano. En este caso $\vec{u}^\infty = \dot{\gamma}y\hat{x}$ por lo que matriz E^∞ es

$$E^\infty = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

y su componente antisimétrica es

$$E^{\infty AS} = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 & 0 \\ -\dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

de lo cual se identifica el vector $\vec{e} = \dot{\gamma}/2\hat{z}$. Luego, la velocidad angular de la esfera es

$$\vec{\Omega} = -\frac{\dot{\gamma}}{2}\hat{z} \quad (2.49)$$

Por otro lado la componente simétrica es

$$E^{\infty S} = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 & 0 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

de manera que el factor $x_j E_{jk}^{\infty S} x_k$ en coordenadas cartesianas es

$$x_j E_{jk}^{\infty S} x_k = (xyz) \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 & 0 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \dot{\gamma}xy \quad (2.51)$$

con lo que el flujo (2.46) es

$$\vec{u}^D = -\frac{5a^3\dot{\gamma}}{2} \frac{xy}{r^5} \vec{r} \quad (2.52)$$

Comparando (2.45) con (2.38) se puede analizar el dipolo de fuerzas que resulta en una esfera

$$d_{ik}^S = -8\pi\eta \frac{5a^3}{6} E_{ik}^{\infty S} = -\frac{10}{3}\pi\eta a^3 \dot{\gamma} (\hat{x}\hat{y} + \hat{y}\hat{x}) \quad (2.53)$$

que se puede diagonalizar como

$$d_{ik}^S = -\frac{10}{3}\pi\eta a^3 \dot{\gamma} \left[\frac{(\hat{x} + \hat{y})(\hat{x} + \hat{y})}{2} - \frac{(\hat{x} - \hat{y})(\hat{x} - \hat{y})}{2} \right] \quad (2.54)$$

que se interpreta como dos pares de fuerza opuestas dirigidas hacia adentro en 135° y hacia afuera en 45° . La magnitud de cada una de estas fuerzas puntuales es

$$f = \frac{5}{3}\pi\eta a^2 \dot{\gamma} \quad (2.55)$$

Capítulo 3

Suspensiones Pasivas

3.1. Resumen

En este capítulo estudiaremos la auto-difusión inducida por el cizalle en una suspensión diluida de esferas no Brownianas del mismo tamaño a , para distintas fracciones volumétricas $\phi = 4\pi a^3 N/3V$ de partículas. La suspensión es sometida a un cizalle simple en el límite de número de Reynolds igual a cero. Las partículas serán simuladas considerando el primer término en la expansión multipolar para las interacciones hidrodinámicas y una fuerza repulsiva de corto alcance se agregará para impedir que las partículas se traslapen entre sí.

El régimen difusivo final es establecido después de largos tiempos ($t_{\text{difusion}} \sim \phi^{-3/2}$), con un coeficiente de difusión proporcional a ϕ^2 , como es esperado en presencia de una fuerza repulsiva de corto alcance. Antes de que el régimen difusivo sea establecido hay un comportamiento subdifusivo muy importante, particularmente en la dirección del gradiente de velocidades. Como estudiamos en el capítulo 2, cada par de interacciones hidrodinámicas es reversible, lo que no permite que las partículas migren a otras líneas de flujo. Pero en el caso de una suspensión diluida, debido a la incoherencia entre las interacciones de a pares que se dan entre las partículas, es que se observa a tiempos cortos un plateau en el desplazamiento cuadrático medio que aumenta en su duración a medida que ϕ decrece. Luego, un primer régimen difusivo es establecido debido a las interacciones entre tres partículas. Este régimen tiene un coeficiente de difusión que cambia como $D^{(1)} \sim \phi^{2.4}$ con la fracción volumétrica de partículas. A tiempos más largos un fenómeno parecido al *caging* es observado. Las partículas permanecen por largos tiempos difundiendo en la vecindad de algunas posiciones, hasta que eventualmente grandes desplazamientos son producidos, moviendo la partícula a una nueva posición y este fenómeno resulta en grandes valores

para la kurtosis en la distribución de desplazamientos. Esta migración es producida debido a que el número de colisiones debido a la interacción repulsiva de corto alcance aumenta. Después de que estos grandes desplazamientos se repiten, el régimen difusivo es establecido.

Este capítulo está organizado de la siguiente manera: En la sección 3.3 se discuten las interacciones hidrodinámicas, en la sección 3.4 se presentan las ecuaciones básicas para describir la evolución del sistema a número de Reynolds igual a cero en el régimen diluido. En la sección 3.5, se describe el método de simulación y la fuerza repulsiva (no-hidrodinámica) utilizada. Los resultados son presentados en la sección 3.6. Finalmente, las conclusiones y las perspectivas son entregadas en la sección 3.7.

3.2. Introducción

Las partículas que componen una suspensión a bajo número de Reynolds, que son expuestas a un cizalle simple, experimentan migraciones aleatorias a través de las líneas de flujo. Estas migraciones se deben a las interacciones hidrodinámicas que se producen entre pares de partículas, las que son perfectamente reversibles si no hay más de dos partículas pero que se vuelven irreversibles cuando se involucran más de tres partículas [10]. Estas fluctuaciones en la posición de las partículas, más tarde, deriva en un régimen difusivo conocido como difusión auto-inducida por el cizalle. Este fenómeno fue observado, experimentalmente, en la década de los 80 por Gadala-María & Acrivos [11] en suspensiones densas y luego el fenómeno fue reproducido incluso en suspensiones diluidas. En realidad para obtener esta migración aleatoria en la suspensión sólo basta romper la simetría en las interacciones reversibles entre partículas, mediante la presencia de una pared o bien por la presencia de más de dos partículas interactuando a través del fluido. Debido a que en el límite de bajo número de Reynolds, las ecuaciones que describen el movimiento del fluido y las partículas son lineales (ecuaciones de Stokes) [44], distintos métodos numéricos han sido desarrollados para estudiar el problema de la auto-difusión. Esta auto-difusión ha mostrado ser particularmente sensible a la forma en que son modeladas las interacciones de corto alcance, que teóricamente corresponden a interacciones debido a las fuerzas de lubricación en la superficie de las partículas. Métodos como la dinámica Stokesiana han sido utilizados para resolver problemas de reología y cálculos de difusividad en suspensiones Brownianas densas [13–15] así como también en suspensiones no-Brownianas densas y últimamente en suspensiones de bacterias. Métodos híbridos muestran que la auto-difusión de una partícula que funciona como un trazador en

una suspensión semi diluida de esferas, es mayor que la difusividad de las partículas en suspensión y esta difusividad es proporcional al cuadrado de la concentración [16].

3.3. Interacciones Hidrodinámicas

Cuando dos esferas son puestas en un cizalle en régimen de Stokes, su interacción hidrodinámica es recíproca [44]. Como consecuencia, después de un encuentro, éstas vuelven a su líneas de flujo inicial, produciendo un desplazamiento transversal nulo, como se muestra en la primera fila de la figura (3.1).

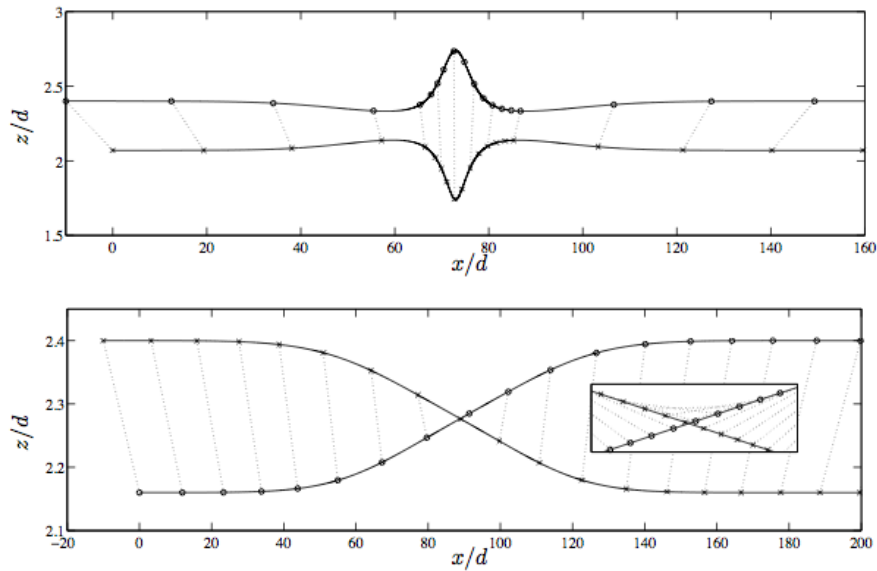


Figura 3.1: Esferas del mismo tamaño interactuando hidrodinámicamente. Arriba: De manera recíproca, en la región del volumen. Abajo: Realizando un swapping, cercanas a una pared. (Y. Wang, R. Mauri, and A. Acrivos, [10])

Por lo tanto si sólo encuentros binarios son producidos, la auto-difusión inducida por el cizalle transversal debería cancelarse. De todas maneras, una configuración no recíproca se puede dar cuando interactúan tres partículas en un cizalle simple. Estas interacciones entre tres cuerpos producen migraciones a través de las líneas de flujo, y se obtiene una difusión transversal. La difusión resultante es proporcional al cuadrado de la fracción volumétrica de partículas [10]. A pequeñas fracciones volumétricas ϕ , los encuentros entre tres partículas son raros y otros mecanismos

entran en juego para producir la difusión transversal. Experimentalmente, la rugosidad de las esferas en la superficie hace que las interacciones entre dos partículas no sea exactamente recíproca, y pequeños desplazamientos entre las líneas de flujos son posibles. Este tipo de rugosidad analíticamente es reproducido utilizando una fuerza repulsiva que actúa normal a la superficies de las esferas, por lo que esto no permite que las esferas se acerquen más allá de sus asperezas y esta fuerza no opone resistencia a que las esferas se separen. Utilizando este tipo de interacción la difusión auto-inducida por el cizalle se desarrolla, con un coeficiente de difusión proporcional a la fracción volumétrica de partículas y a su rugosidad [12]. Además de las interacciones hidrodinámicas López *et al.* [18], utilizó dos modelos diferentes para las fuerzas no-hidrodinámicas entre partículas. Primero, un modelo para partículas rugosas fue utilizado y segundo una fuerza repulsiva de corto alcance fue introducida. Se encontró que el coeficiente de difusión era extremadamente sensible al mecanismo responsable de las interacciones no-recíprocas. Cuando la fuerza es de corto alcance el coeficiente de difusión es proporcional a ϕ^2 . Por otra parte cuando el rango de las interacciones no-hidrodinámicas crece, se produce una dependencia del coeficiente de difusión proporcional a ϕ [15].

Los efectos de las paredes pueden aumentar la difusión inducida por el cizalle. En un trabajo experimental realizado por Zarraga *et al.* [19] usando esferas rugosas en presencia de paredes, el coeficiente de difusión fue al menos un orden de magnitud más grande que el predicho para un modelo de esferas rugosas. En un trabajo numérico realizado por Zurita-Gotor *et al.* [17] se demostró que cercano a una pared, dos partículas interactúan mostrando lo que ellos llamaron *swapping trajectories*, las partículas no se pasaban unas a otras como en el espacio libre (primera fila Fig.(3.1)), sino que intercambiaban su posición en las líneas de flujo (segunda fila Fig.(3.1)), este nuevo tipo de interacción producía un aumento en la migración cruzada a través de las líneas de flujo. Este efecto observado por Zarraga *et al.* fue reproducido consistentemente utilizando simulaciones numéricas [20].

Finalmente, en una veta distinta, queremos resaltar el análisis desarrollado por Düring *et al.* [21], quien usó métodos numéricos para estudiar el efecto de pequeñas fluctuaciones que acopladas con movimiento caótico, rompen la reversibilidad de las ecuaciones de Stokes cuando la razón de corte es revertida. Este efecto puede producir también difusión inducida por el cizalle rompiendo la reversibilidad exacta de los encuentros entre dos cuerpos.

3.4. Ecuaciones de movimiento

Consideremos el movimiento de N esferas idénticas de radio a en la región del volumen de una celda rectangular de volumen V en 3 dimensiones. La suspensión está bajo un cizalle simple en la dirección \hat{x} con velocidad $\vec{u}^\infty = \dot{\gamma}y\hat{x}$, donde $\dot{\gamma}$ es la razón de corte. La dirección \hat{x} es la dirección de cizalle, \hat{y} es conocida como la dirección gradiente, y la dirección \hat{z} como la dirección vorticidad. Las esferas son no Brownianas y neutralmente boyantes. El número de Reynolds de las partículas es asumido muy pequeño, por lo que los efectos inerciales son despreciables. Considerando esto la dinámica del fluido es descrita por las ecuaciones de Stokes con las condiciones de borde correspondientes sobre la superficie de las N esferas.

En el caso de una baja concentración de partículas, las partículas interactúan por medio de perturbaciones hidrodinámicas en la aproximación de campo lejano. En este regimen, el flujo producido por una partícula puede ser calculado usando una expansión multipolar, reteniendo sólo los primeros términos. A cero número de Reynolds, tanto el torque total, como la fuerza total en cada partícula es idénticamente cero; por lo tanto, la primera contribución que no es cero en la expansión multipolar es la parte simétrica del dipolo de fuerzas, es decir, el *stresslet* [44].

El campo de velocidades debido a la presencia de una m -ésima esfera es dado por, (Eq.2.38)

$$u_i(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r} - \vec{R}_m) \mathbf{d}_{kj}^{Sm}, \quad (3.1)$$

donde η es la viscosidad del fluido, \vec{R}_m es la posición de la esfera, $\mathbf{G}_{ij,k}$ es el gradiente del tensor de Oseen, y el tensor \mathbf{d}^{Sm} es la parte simétrica del dipolo de fuerzas de la esfera m -ésima. r_i son las coordenadas cartesianas del vector \vec{r} . Despreciando las correcciones de Faxén, la que es pequeña a bajas concentraciones, la velocidad de una esfera dada es directamente la velocidad del fluido en esa posición

$$u_i^{\text{esfera}}(\vec{R}_n) = u_i^\infty(\vec{R}_n) + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{m \neq n} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) \mathbf{d}_{kj}^{Sm}, \quad (3.2)$$

es decir, la suma del flujo externo más la suma del flujo producido por las otras partículas. Cuando las esferas están en equilibrio mecánico, la parte simétrica del dipolo de fuerzas es dado en términos del valor local del gradiente de velocidades, (Eq. 2.53)

$$\mathbf{d}_{jk}^{Sm} = 8\pi\eta \frac{5a^3}{6} \mathbf{E}_{jk}^{Sm}, \quad (3.3)$$

$$= 8\pi\eta \frac{5a^3}{6} (\nabla_k u_j^{\text{esfera}}(\vec{R}_m))^S. \quad (3.4)$$

Luego, reemplazando en la Eq. (3.2)

$$\begin{aligned}\nabla_k u_j^{\text{esfera}}(\vec{R}_m) &= \frac{\partial u_j^{\text{esfera}}}{\partial r_k} \\ &= \frac{\partial u_j^\infty(\vec{R}_m)}{\partial r_k} + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{m \neq q} \frac{\partial \mathbf{G}_{jl,p}(\vec{R}_q - \vec{R}_m)}{\partial r_k} \mathbf{d}_{pl}^{Sq}\end{aligned}$$

donde,

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{jk}^{\infty m} &= \frac{\partial u_j^\infty(\vec{R}_m)}{\partial r_k} \\ \mathbf{G}_{jl,pk} &= \frac{\mathbf{G}_{jl,p}(\vec{R}_n - \vec{R}_m)}{\partial r_k}\end{aligned}$$

con,

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{jl,pk} &= -\frac{1}{r^3}(\delta_{jl}\delta_{pk} - \delta_{jp}\delta_{lk} - \delta_{lp}\delta_{jk}) + \frac{15}{r^7}r_j r_l r_p r_k \\ &\quad - \frac{3}{r^5}(\delta_{jk}r_l r_p + \delta_{lk}r_p r_j + \delta_{pk}r_j r_l \\ &\quad - \delta_{jl}r_p r_k + \delta_{jp}r_l r_k + \delta_{lp}r_j r_k)\end{aligned}$$

aquí, \mathbf{d}^{Sm} corresponde a la parte simétrica del dipolo de fuerzas en la posición de la esfera m -ésima.

$$\mathbf{d}_{jk}^{Sm} = 8\pi\eta \frac{5a^3}{6} \left(\mathbf{E}_{jk}^{\infty mS} + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{q \neq m} \mathbf{G}_{jl,pk}^S \mathbf{d}_{pl}^{qS} \right), \quad (3.5)$$

De esta forma las ecuaciones a resolver son,

$$\begin{aligned}u_i^{\text{esfera}} &= \bar{u}^\infty + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{m \neq n} \mathbf{G}_{ij,k} \mathbf{d}_{kj}^{Sm} \\ \mathbf{d}_{jk}^{Sm} &= 8\pi\eta \frac{5a^3}{6} \left(\mathbf{E}_{jk}^{\infty mS} + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{q \neq m} \mathbf{G}_{jl,pk}^S \mathbf{d}_{pl}^{qS} \right),\end{aligned} \quad (3.6)$$

Una de las principales dificultades de resolver el sistema de ecuaciones ec. (3.6), es que para calcular la velocidad de la partícula m -ésima debemos conocer el dipolo de las otras $N - 1$ partículas en la suspensión y la ecuación para encontrar el dipolo de una partícula depende a su vez de las $N - 1$ otras partículas, lo que nos lleva a

una ecuación recursiva compleja de resolver numéricamente debido al alto costo en las simulaciones a realizar. Para un sistema diluido, donde la fracción volumétrica de partículas $\phi = \frac{4\pi a^3 N}{3V}$ es pequeña, podemos tomar la expansión de Born para las interacciones entre partículas, ya que podemos suponer que las partículas siempre están lejanas unas de otras, luego si reemplazamos en (3.5):

$$d_{jk}^{Sm} = 8\pi\eta \frac{5a^3}{6} \mathbf{E}_{jk}^{\infty nS} + \frac{5a^3}{6} \sum_{m \neq q} \mathbf{G}_{jl,pk} \mathbf{d}_{pl}^{Sq} \quad (3.7)$$

Utilizando la aproximación de Born a distintos órdenes tenemos,

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{jk}^{(0)Sm} &\approx 0 \\ \mathbf{d}_{jk}^{(1)Sm} &\approx 8\pi\eta \frac{5a^3}{6} \mathbf{E}_{jk}^{\infty Sm} + 0 \\ \mathbf{d}_{jk}^{(2)Sm} &\approx 8\pi\eta \frac{5a^3}{6} \mathbf{E}_{jk}^{\infty Sm} + \frac{5a^3}{6} \sum_{m \neq q} \mathbf{G}_{jl,pk} (8\pi\eta \frac{5a^3}{6} \mathbf{E}_{pl}^{\infty Sq}) \end{aligned}$$

A orden 0 las partículas no interactúan, a orden 1 la interacción es recíproca mientras que orden 2, ya las interacciones son con todas las partículas en el volumen. Si nos quedamos con la aproximación hasta segundo orden, el stresslet es

$$\mathbf{d}_{jk}^{Sn} = 8\pi\eta \frac{5a^3}{6} \left(\mathbf{E}_{jk}^{\infty nS} + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{m \neq n} \mathbf{G}_{jl,pk}^S \mathbf{E}_{pl}^{\infty mS} \right), \quad (3.8)$$

Con lo que obtenemos una ecuación no recursiva para el dipolo de fuerzas, la que es fácilmente integrable, donde $\mathbf{E}^{\infty S}$ corresponde a la parte simétrica de la razón de estiramiento del cizalle impuesto. Sustituyendo Eq. (3.8) en (3.2), obtenemos la velocidad de cada esfera. El valor computacional para obtener las velocidades de cada partícula es $\mathcal{O}(N^2)$.

3.5. Método de simulación

La simulación consiste en un tipo de dinámica molecular, en donde conocidas las posiciones se procede a integrar las ecuaciones para conocer la velocidad y el dipolo de las partículas en ese paso y así conocer la posición en el paso siguiente. Para calcular el dipolo de cada partícula hacemos interacción partícula-partícula (P-P) por lo que el costo de la simulación en ese paso es $\mathcal{O}(N^2)$, conocidos los dipolos se procede a integrar la velocidad que nuevamente es interacción P-P. Para integrar

las ecuaciones de movimiento usamos el método del predictor–corrector de Adams–Bashforth–Moulton (descrito en la sec. 3.5.2) con paso de tiempo de $\Delta t = 0.05\tau_{\dot{\gamma}}$, en donde $\tau_{\dot{\gamma}} = 1/\dot{\gamma}$ es la escala de tiempo natural del problema, y debido a la periodicidad de las condiciones de borde y al cizalle impuesto las posiciones son actualizadas después de la fase correctora utilizando la condición de borde de Lees–Edwards (sec. 3.5.1). En la figura (3.2) se hace un esquema de la simulación realizada.

En las simulaciones se integran numéricamente las ecuaciones de movimiento de $N = 1000$ esferas idénticas. Las partículas son inicialmente ubicadas aleatoriamente dentro de una caja rectangular de dimensiones $L_x = 2L$, $L_y = L_z = L$. En donde variamos L en el rango $40a$ a $80a$ para obtener fracciones volumétricas en el rango $\phi \approx 4.0 \times 10^{-3}$ a $\phi \approx 3.2 \times 10^{-2}$. El radio de las partículas a , la razón de corte $\dot{\gamma}$, y la viscosidad del fluido η fijan las unidades de largo, tiempo y masa. Por lo que cambiar sus valores no afecta la dinámica del sistema, excepto por escalamientos directos. El único parámetro que queda libre es la fracción volumétrica ϕ . La suspensión no está confinada, por lo que condiciones de borde periódicas son utilizadas. Para tomar en cuenta el cizalle simple, usamos las condiciones de borde de Lees-Edwards, los métodos numéricos utilizados en las simulaciones son descritos en la siguientes subsecciones (3.5.2,3.5.1). Como fue discutido en Brady y Bossis [22], un cuidado especial debe ser tomado al considerar condiciones de borde periódicas en sistemas diluidos con el fin de no introducir correlaciones artificiales con las imágenes de las partículas. Las interacciones de largo alcance entre los pares de partículas dados por, $\mathbf{G}_{i,j,k}$ en (3.1) y (3.8) dictan que la suma de Ewald puede ser necesaria [23, 24]. La suma de Ewald se planteó inicialmente como un método para resolver problemas de electroestática. Este método consiste en pasar de un sistema periódico infinito, en el que la caja de simulación se réplica en todo el espacio y las partículas en la caja principal interactúan con todas las imágenes periódicas alrededor, a uno separado entre interacciones cercanas para las cuales existe un radio de corte finito pequeño en donde las ecuaciones se integran P-P (orden de integración N^2) y para interacciones lejanas en donde mediante una transformada de Fourier se pueden integrar las ecuaciones a orden $N \log N$. Debido a que las interacciones hidrodinámicas son partícula-partícula, Hasimoto [3] describió un método para simplificar estos cálculos utilizando la suma de Ewald. De cualquier forma, su uso es descartado en este estudio debido al costo computacional y porque una replica infinita del sistema es esperado que no afecte enormemente el proceso de difusión. Además el promedio angular del tensor de interacción $\mathbf{G}_{i,j,k}$ se anula; por lo tanto, el efecto de las imágenes lejanas se cancela, sin producir un efecto neto en órdenes de magnitud importantes. En consecuencia, las interacciones de largo alcance son tratadas utilizando la convención de

imagen mínima a través de las condiciones de borde. La condición de imagen mínima consiste en replicar la caja de simulación una sola vez en todas las direcciones y al interactuar las partículas dentro de la caja de simulación mide las distancias tanto entre las partículas reales, así como también con sus imágenes quedándose con la interacción más cercana.

El tamaño finito de las esferas, es impuesto, al considerar una fuerza repulsiva de corto alcance entre ellas, para prevenir que se traslapen. Esta fuerza, es agregada, a las ecuaciones de movimiento en la forma de una velocidad anti-traslape en la dirección $\hat{r} = \frac{\vec{R}_n - \vec{R}_m}{|\vec{R}_n - \vec{R}_m|}$.

$$\vec{u}_{\text{repulsiva}} = f \frac{(2a - r)}{2a} \hat{r}, \quad r < 2a, \quad (3.9)$$

donde $r = |\vec{R}_n - \vec{R}_m|$ es la distancia entre dos partículas. El valor de la intensidad de la fuerza es fijada en $f = 0.0015a\dot{\gamma}$, la que es suficientemente pequeña para asegurar una alta precisión en cada paso de tiempo, pero lo suficientemente grande para asegurar el menor número posible de traslapes entre las partículas. La fuerza anti-traslape es no recíproca, similar a las usadas en la dinámica Stokesiana [15, 18]. Luego, es esperado que la difusión sea producida por las colisiones y que el coeficiente de difusión sea proporcional a ϕ^2 [15].

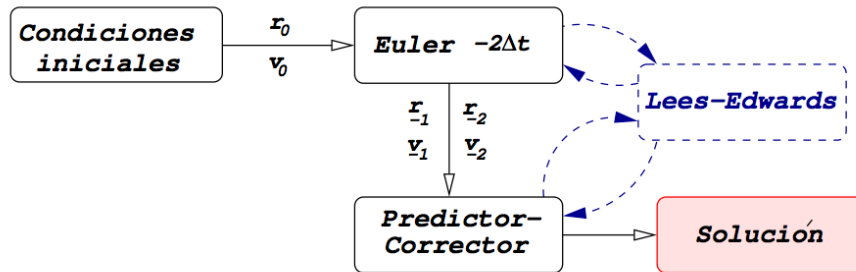


Figura 3.2: Esquema del algoritmo de simulación utilizado en esta parte del trabajo. (De izquierda a derecha en la figura) Primero se entregan las condiciones iniciales para cada partícula, una posición al azar \vec{r}_0 . Luego, mediante una iteración simple utilizando el método de Euler se encuentran la posición y velocidad en las siguientes dos iteraciones con las correcciones de Lees-Edwards para el cizalle impuesto. A continuación sólo se continúa iterando encontrando las siguientes posiciones y velocidades para corregirlas con Lees-Edwards e integrarlas usando el método del predictor-corrector.

3.5.1. Condición de borde de Lees-Edwards

Considere un sistema que tiene un esfuerzo de corte uniforme $\dot{\gamma}$ en un sistema en 3D. Consideremos una partícula que para $t = 0$ se encuentra en $\vec{r} = (x, y, z)$, mientras que su imagen se ubica en $\vec{r}' = (x + mL_x, y + nL_y, z + lL_z)$, con $m, n, l \in \{-1, 0, 1\}$. Debido al efecto del cizalle, las imágenes del borde superior e inferior se moverán con una diferencia de velocidad $n\dot{\gamma}L_y$ en la dirección \hat{x} . Por lo tanto, en el curso del tiempo, las imágenes tendrán las siguientes posiciones y velocidades:

$$\vec{r}' = (x + mL_x + n\dot{\gamma}L_y t, y + nL_y, z + lL_z) \quad (3.10)$$

$$\vec{v}' = (v_x + n\dot{\gamma}L_y, v_y, v_z) \quad (3.11)$$

con una dependencia explícita del tiempo.

Cuando una partícula cruza la frontera, ésta puede reemplazarse por la correspondiente imagen tal que no se cree una discontinuidad. Por ejemplo, si una partícula cruza el borde superior, ésta debe ser reemplazada de la siguiente manera:

$$\vec{r} = (x, y, z) \rightarrow \vec{r}' = ((x - \dot{\gamma}L_y t) \bmod L_x, y - L_y, z - L_z) \quad (3.12)$$

$$\vec{v} = (v_x, v_y, v_z) \rightarrow \vec{v}' = (v_x - \dot{\gamma}L_y, v_y, v_z) \quad (3.13)$$

Notamos que en el caso $\dot{\gamma} = 0$, la condición de borde de Lees-Edwards toma la forma de la usual condición de borde periódica.

3.5.2. Método predictor-corrector

Para integrar la ecuación de movimiento de las partículas usaremos un algoritmo multi-step del tipo predictor-corrector, llamado el método Adams-Bashforth-Moulton (ABM) a tercer orden, puesto que este método presenta buenas propiedades de estabilidad y resulta ser razonablemente alta su precisión. El primer paso del algoritmo corresponde al de predicción (P) de la posición \bar{r}_{n+1} en función de la velocidad en dos pasos anteriores el $n - 1$ y el $n - 2$.

$$\bar{r}_{n+1} = r_n + \frac{\Delta t}{12} (23v_n - 16v_{n-1} + 5v_{n-2}) + O(\Delta t^4) \quad (3.14)$$

Luego, usando las posiciones predichas \bar{r}_{n+1} para las partículas calculamos v_{n+1} usando las ecuaciones 3.6 y 3.8. Finalmente, conocida las nuevas velocidades realizamos la corrección (C) a las posiciones

$$r_{n+1} = r_n + \frac{\Delta t}{12} (5v_{n+1} + 8v_n - v_{n-1}) + O(\Delta t^4) \quad (3.15)$$

Notamos que este algoritmo no solo necesita las posiciones y velocidades de las partículas en un cierto instante t como condiciones iniciales, sino también necesita conocer el sistema en $t - \Delta t$ y $t - 2\Delta t$, por lo que requiere de otro método que si sea auto suficiente para arrancar, en nuestro caso usaremos el método de Euler para propagar el sistema en 3 pasos de tiempo.

$$r_{n+1} = r_n + v_n \Delta t \quad (3.16)$$

Este método es muy útil al resolver interacciones del tipo partícula-partícula ya que para resolver la eq. (3.14) necesitamos integrar sólo una vez las ecuaciones para la velocidad de las partículas y luego en la eq. (3.15) volver a integrar las ecuaciones con la nueva posición corregida.

3.6. Resultados

3.6.1. Desplazamiento cuadrático medio

Aquí nos enfocaremos en el proceso de difusión en la direcciones transversales al movimiento. El desplazamiento cuadrático medio en la dirección gradiente $\langle \Delta y(t)^2 \rangle$ y en la dirección de vorticidad $\langle \Delta z(t)^2 \rangle$ son calculados utilizando que si $\langle \Delta x^2 \rangle \propto \dot{\gamma} t$ el régimen en x es difusivo y $D \sim \frac{1}{2t} \langle \Delta x^2 \rangle$. Los promedios son calculados sobre las partículas y sobre 10 corridas. Para eliminar cualquier efecto de las condiciones iniciales, el sistema se deja relajar por un largo tiempo (el tiempo que demora en establecer el régimen difusivo) sin tomar promedios: $t_{\text{relajar}} \approx 7\tau_{\alpha_2} \approx 900\tau_{\dot{\gamma}}/\phi^{1.5}$ (ver discusión en las Secs. 3.6.5 y 3.6.6).

Se encontró, que a bajas concentraciones, el régimen difusivo—desplazamiento cuadrático medio que crece linealmente con el tiempo— toma tiempos extremadamente largos para establecerse, y antes de que se establezca presenta una rica dinámica subdifusiva. En la figura 3.3 se presenta el desplazamiento cuadrático medio en la dirección gradiente en la escala log-log. Cinco regímenes fueron encontrados. Primero (I), a tiempos cortos (antes de τ_i), el desplazamiento cuadrático medio crece rápidamente. Segundo (II), se obtiene un plateau, con una leve disminución de $\langle \Delta y(t)^2 \rangle$. después del plateau (III), un primer régimen difusivo es obtenido (debido a que hay un crecimiento lineal en el desplazamiento cuadrático medio). Luego, las partículas entran en un régimen subdifusivo (IV) que termina en un tiempo τ_{α_2} . Después de eso, un segundo régimen difusivo (V) aparece y continúa hasta el tiempo límite de simulación usado en este trabajo.

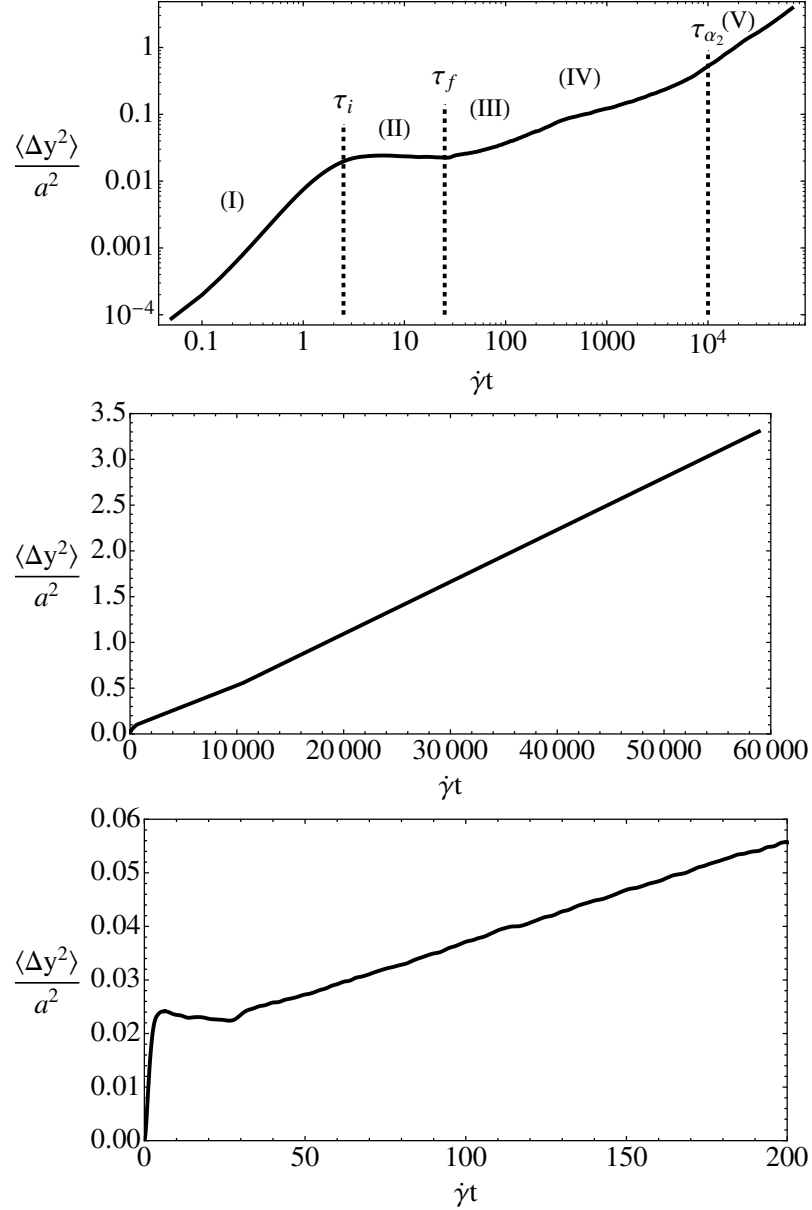


Figura 3.3: Arriba: Desplazamiento cuadrático medio en la dirección del gradiente de velocidades $\langle \Delta y^2(t) \rangle$ para $\phi = 0.033$ en una escala log–log. Cinco regímenes son identificados: Un crecimiento inicial para $t < \tau_i$, un plateau cuando $\tau_i < t < \tau_f$, un primer régimen difusivo para $\tau_f < t$, seguido por un régimen subdifusivo que termina en τ_{α_2} , y finalmente un segundo régimen subdifusivo para $t > \tau_{\alpha_2}$. Medio: Lo mismo pero en una escala lineal; el segundo régimen difusivo es aparente. Abajo: El mismo pero a tiempos más pequeños para mostrar el primer régimen difusivo.

Un comportamiento similar, pero con regímenes no tan diferenciados, es también obtenido en la dirección de vorticidad (Fig. 3.4), en donde el proceso difusivo es incluso más lento que en la dirección del gradiente de velocidades.

En las siguientes subsecciones, los cinco regímenes son analizados por separado. Estos serán caracterizados, y se dará su interpretación.

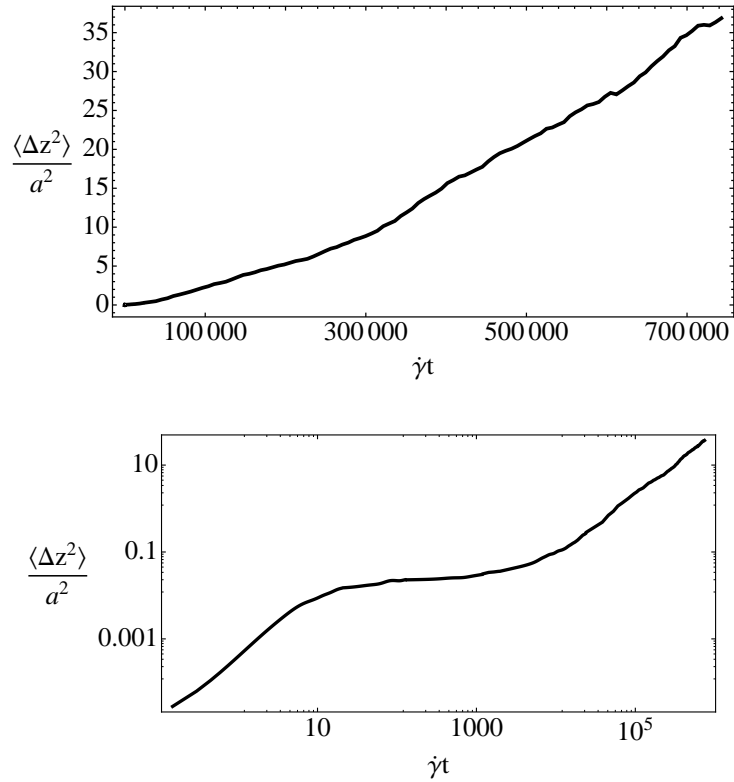


Figura 3.4: De arriba hacia abajo: Primero, se presenta el desplazamiento cuadrático medio en la dirección de la vorticidad $\langle \Delta z^2(t) \rangle$ para $\phi = 0.033$ en escala lineal. Segundo, se presenta $\langle \Delta z^2(t) \rangle$ para $\phi = 0.033$, en escala logarítmica, por lo que podemos ver tres regímenes, un crecimiento inicial, luego un plateau y más tarde un régimen difusivo.

3.6.2. Régimen I: Crecimiento inicial

El crecimiento inicial en el desplazamiento cuadrático medio puede ser entendido mirando la trayectoria de partículas marcadas (Fig. 3.5). Se observan oscilaciones hacia adelante y hacia atrás. Las oscilaciones son no-periódicas, pero un tiempo ca-

racterístico es obtenido, al calcular la función de autocorrelación, el cual es del orden de unos pocos $\tau_{\dot{\gamma}}$. Las oscilaciones tienen su origen en las interacciones hidrodinámicas entre dos cuerpos: después de un encuentro hidrodinámico las partículas vuelven a su línea de flujo original, debido a la reciprocidad de esta interacción (ver figura 3.1). Como las interacciones hidrodinámicas son de largo alcance, cada partícula interactúa simultáneamente con varias otras, y los efectos se superponen. De cualquier forma, la duración de estas interacciones binarias son todas diferentes, y por lo tanto no construyen una oscilación coherente. De hecho, para un par dado, la duración de la interacción es básicamente $\tau_{\dot{\gamma}} \sqrt{\delta_y^2 + \delta_z^2} / \delta_y$, donde δ_y y δ_z son las separaciones entre dos partículas en el eje y y en el z , respectivamente. El efecto de δ_z es producir una serie de periodos de oscilación que interfieren destructivamente. Esta superposición también predice un tiempo de correlación más grande pero del orden de $\tau_{\dot{\gamma}}$.

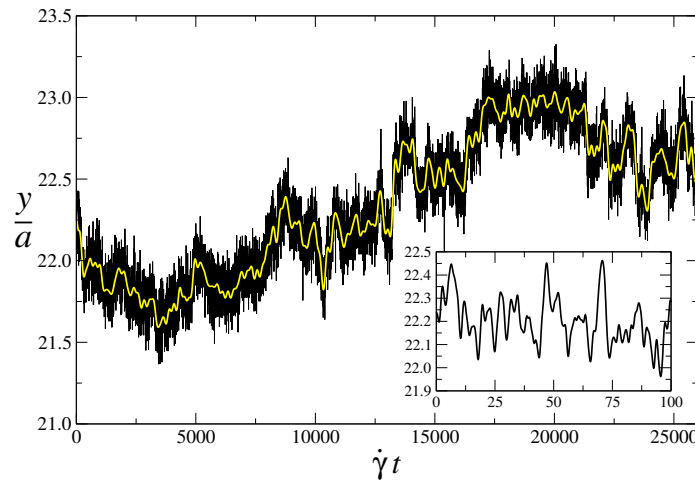


Figura 3.5: Trayectoria en la dirección del gradiente para una partícula marcada (curva negra) y una trayectoria con filtro pasa-bajo que elimina un 99.95 % de las frecuencias (curva amarilla). Inserto: Trayectoria a tiempos cortos.

3.6.3. Régimen II: el plateau

Después del crecimiento inicial del desplazamiento cuadrático medio, hay un plateau con un pequeño decrecimiento de los desplazamientos en la dirección de gradiente y un pequeño aumento en la dirección de vorticidad. Esto puede ser entendido en términos de la interferencia destructiva descrita en la subsección anterior como un resultado de las superposiciones de varias interacciones binarias, cada cual es recíproca con distintos periodos.

Para cada valor de la concentración de partículas, el valor promedio de $\langle \Delta y(t)^2 \rangle$ es calculado en el plateau. Esto nos lleva al desplazamiento promedio $R = \left(\overline{\langle \Delta y(t)^2 \rangle} \right)^{1/2}$ en el plateau, como se muestra en la figura Fig. 3.6. R es alrededor de un décimo del radio de la partícula, mucho menor que la distancia interpartícula. Los desplazamientos promedios crecen con la concentración, y al hacer un ajuste con una ley de potencias nos da $R/a = B\phi^b$, con $B = 0.6$ y exponente $b = 0.4$ (Fig. 3.6).

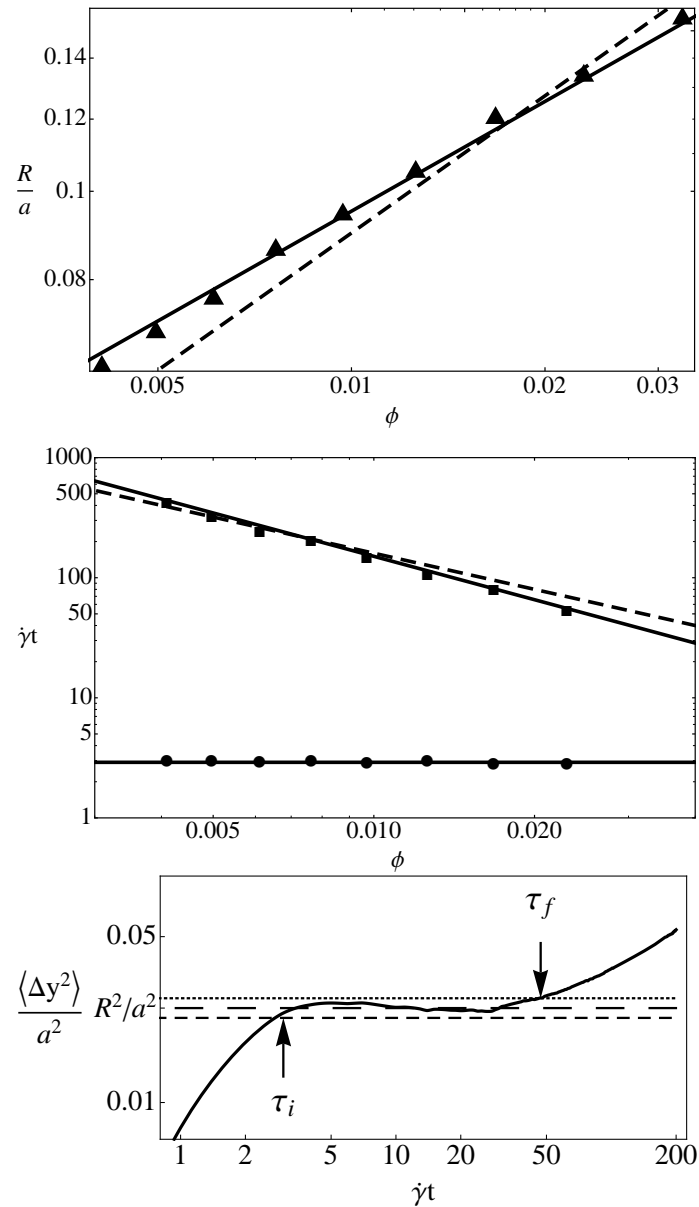


Figura 3.6: Arriba: Desplazamientos cuadráticos en el plateau R como función de la fracción volumétrica de partículas (triángulos sólidos). La línea sólida es el ajuste en leyes de potencia $R/a = B\phi^b$, con $B = 0.6$ y $b = 0.4$. La línea punteada es un ajuste en ley de potencias para un exponente de $1/2$. Medio: Tiempo inicial τ_i (círculos sólidos) y tiempo final τ_f (cuadrados sólidos) del régimen del plateau como función de la fracción volumétrica. Las líneas sólidas son ajustes en leyes de potencia. La línea punteada es un ajuste en leyes de potencia con exponente -1 . Abajo: Procedimiento para calcular τ_i y τ_f como los instantes cuando el desplazamiento cuadrático medio iguala $(0.92R)^2$ y $(1.08R)^2$, donde R es el desplazamiento promedio en el plateau.

Los instantes iniciales y finales del régimen del plateau, τ_i y τ_f , respectivamente, son obtenidos al calcular los instantes en los cuales el desplazamiento medio es más o menos el 8 % sobre y el 8 % bajo el valor de R (última figura en Fig. 3.6). Los valores calculados, normalizados con la razón de estiramiento $\dot{\gamma}$, son presentados en la figura Fig. 3.6 para la dirección en y y en la figura Fig. 3.7 para la dirección z . Los tiempos iniciales, en el orden de $\tau_{\dot{\gamma}}$, son independientes de la concentración en ambas direcciones. Los tiempos finales, por otro lado, decrecen al aumentar la concentración.

Un ajuste en leyes de potencia nos da que los tiempos de término del plateau vienen dados por $\tau_f = 22/\phi^{0.65}\tau_{\dot{\gamma}}$ para la dirección de vorticidad (Fig. 3.7) y $\tau_f = 0.6/\phi^{1.2}\tau_{\dot{\gamma}}$ para la dirección gradiente (última figura en Fig. 3.6). Los exponentes son similares a una ley inversa pero no exactamente compatible con ésta. En la dirección vorticidad el plateau es más duradero, aunque τ_i comienza más tarde $\tau_i = 36\tau_{\dot{\gamma}}$ en \hat{z} ($\tau_i = 3\tau_{\dot{\gamma}}$ en \hat{y}), y en ambas direcciones este tiempo es constante.

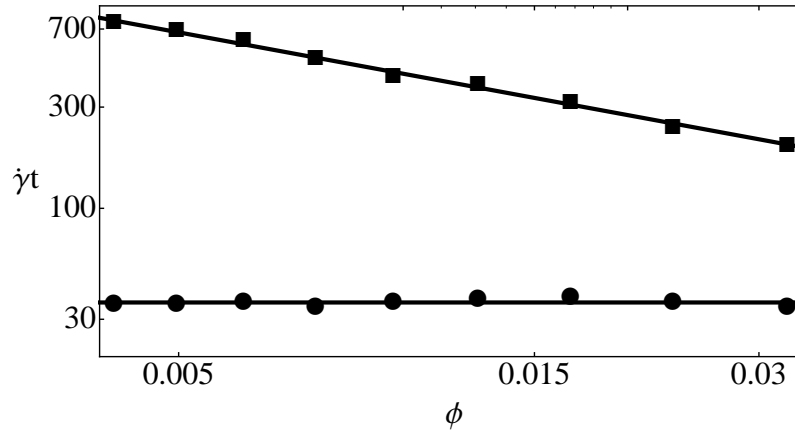


Figura 3.7: Se muestra el tiempo inicial τ_i (círculos negros) y tiempo final τ_f (cuadrados negros) para el régimen del plateau en la dirección de vorticidad en escala logarítmica. Las líneas sólidas indican los ajustes para el tiempo inicial 36 y el tiempo final $22\phi^{-0.65}$.

3.6.4. Régimen III: Primer régimen difusivo

En las oscilaciones descritas en la subsección 3.6.2, las partículas no vuelven exactamente a su posición inicial después de cada ciclo, produciendo pequeños desplazamientos que son aleatorios en signo y amplitud. Acumulando estos desplazamientos

aleatorios resultan en un movimiento difusivo (ver trayectoria para un filtro pasabajo (en la Fig. 3.5). El coeficiente de difusión para distintas fracciones volumétricas ϕ es presentado en la figura Fig. 3.8. Una ajuste con ley de potencia nos da

$$D_{yy}^{(1)} = 0.41\dot{\gamma}a^2\phi^{2.44}, \quad (3.17)$$

donde la proporcionalidad a $\dot{\gamma}a^2$ es obtenida por análisis dimensional. El exponente, aunque no es compatible con 2, sugiere que el resultado de este movimiento difusivo es producido por las interacciones de al menos 3 cuerpos. Luego, podemos pensar que si bien los encuentros hidrodinámicos entre dos cuerpos (i.e., no los encuentros cercanos) son recíprocos y no producen migración, la presencia de un tercer cuerpo rompe la reciprocidad y por lo tanto da paso a una difusión neta. El primer régimen difusivo es por lo tanto producido por la acumulación de pequeños desplazamientos a través de las líneas de flujo debido a las interacciones de más de dos cuerpos.

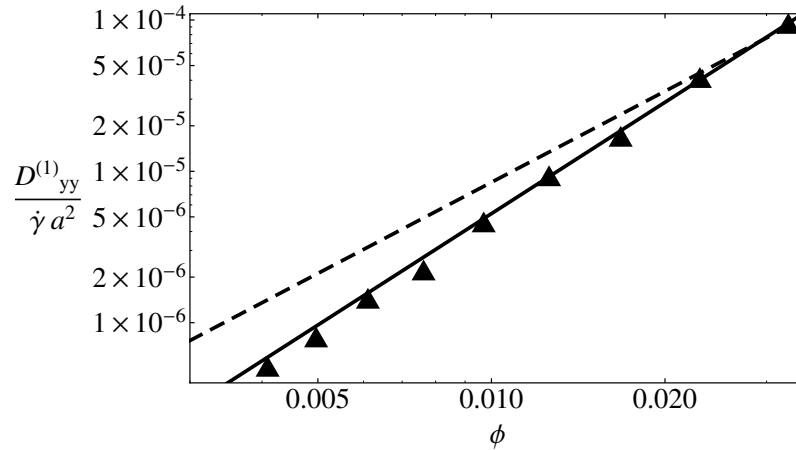


Figura 3.8: Auto difusión $D_{yy}^{(1)}$ como función de la fracción volumétrica en la dirección del gradiente de velocidades y . La curva sólida es el resultado de un ajuste en leyes de potencia. La curva segmentada corresponde a un ajuste para una variación cuadrática ($\sim \phi^2$). Las barras de error son más pequeñas que los símbolos utilizados en la figura.

3.6.5. Régimen IV: subdifusión

Después del plateau y el primer régimen difusivo, se establece un régimen subdifusivo sin un exponente claro en el desplazamiento cuadrático medio. Para describir esta dinámica intermedia, antes que el segundo régimen difusivo sea establecido, se calcula el cuarto cumulante (kurtosis) de la distribución de desplazamientos en la

dirección y .

$$\alpha_2(t) = \frac{\langle \Delta y(t)^4 \rangle}{3\langle \Delta y(t)^2 \rangle^2} - 1, \quad (3.18)$$

el cual se anula para una distribución Gaussiana. En la figura 3.9 se muestra α_2 para $\phi = 0.0168$. A tiempos intermedios, el cuarto cumulante se desvía fuertemente de cero, indicando que la distribución de desplazamientos está lejos de ser Gaussiana. El máximo es encontrado en $t = 30000\tau_\gamma$, el cual está mucho más allá del plateau y esta más bien cercano al instante en que el régimen difusivo es alcanzado. La figura 3.9 muestra τ_{α_2} —el tiempo cuando α_2 se vuelve máximo—el cual decrece cuando ϕ aumenta, consistente con la idea de que el comportamiento subdifusivo es producido por las colisiones entre las partículas. A largos tiempo, la kurtosis decrece y se vuelve negativa aunque con valores pequeños. Esperamos que incluso para tiempos más largos (no accesibles para la simulación), la kurtosis tenderá a cero, consistente con un régimen difusivo.

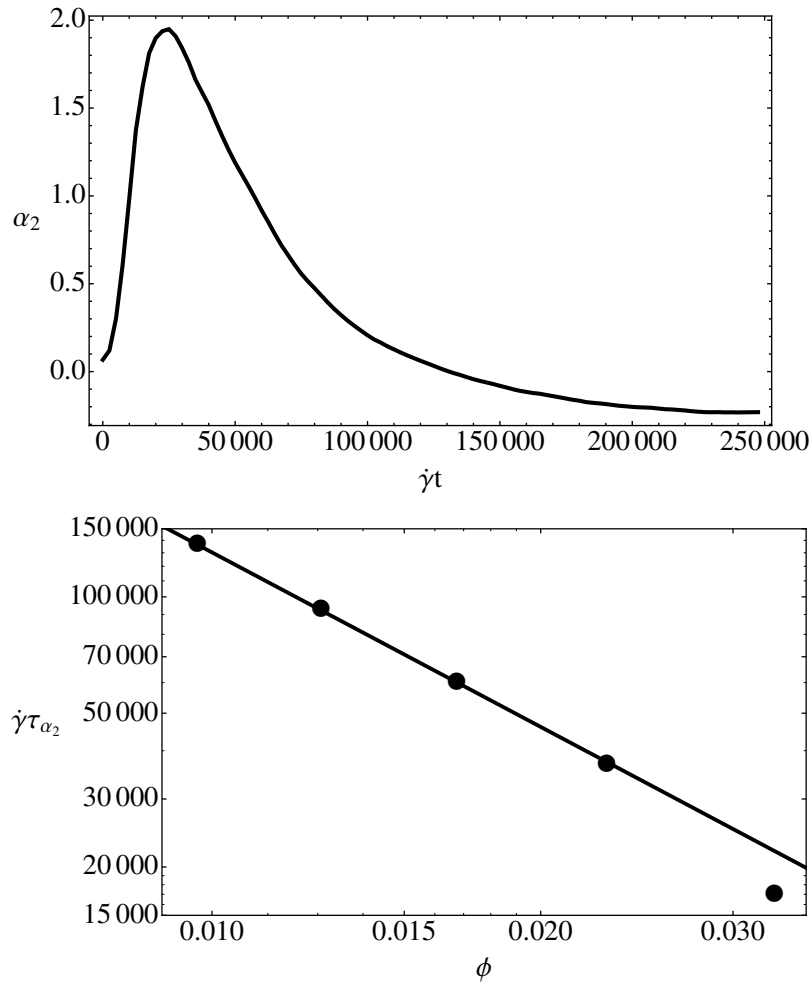


Figura 3.9: Arriba: Kurtosis α_2 de los desplazamientos Δy . La fracción volumétrica es $\phi = 0.0168$. Abajo: Tiempo cuando α_2 se vuelve máximo como función de ϕ . La línea sólida es un ajuste en leyes de potencia para $\tau_{\alpha_2} = 130\tau_{\dot{\gamma}}/\phi^{1.5}$.

La gran desviación de una Gaussiana a tiempos intermedios puede ser entendida mirando las trayectorias de algunas partículas marcadas en el plano $y-z$ en esa escala de tiempo. La distribución de probabilidad en el plano $y-z$ es construida de acuerdo al tiempo de residencia en cada punto. La figura 3.10 muestra la función de distribución para dos partículas marcadas. Un fenómeno similar al *caging* en la transición a vidrio para suspensiones densas de coloides [25] o para granos fluidizados [26] es observado. Las partículas permanecen por largos tiempos en la vecindad de algunas posiciones (ver como un máximo en la probabilidad en la figura), y eventualmente se producen largos desplazamientos, los que mueven a la partícula a una nueva posi-

ción. A grandes tiempos (no se muestra), las partículas realizan repetidamente estos grandes desplazamientos, construyendo el régimen difusivo. En el *caging* usual, antes de alcanzar el régimen difusivo, las partículas son atrapadas en cajas creadas por las otras partículas, y el régimen difusivo es alcanzado sólo cuando las partículas pueden escapar de estas cajas y moverse entre ellas. En el caso que presentamos aquí, el fenómeno observado requiere de una explicación diferente ya que, para que las cajas se formen, una alta densidad de partículas es necesaria. Aquí, los largos tiempos de residencia son debido a la reciprocidad de las interacciones hidrodinámicas y los pequeños desplazamientos producidos por los encuentros hidrodinámicos de muchos cuerpos, y las partículas son movidas de estas posiciones cuando una interacción no recíproca, repulsión de corto alcance, toma lugar. Los grandes desplazamientos entonces son producidos por colisiones binarias de corto alcance no reversibles.

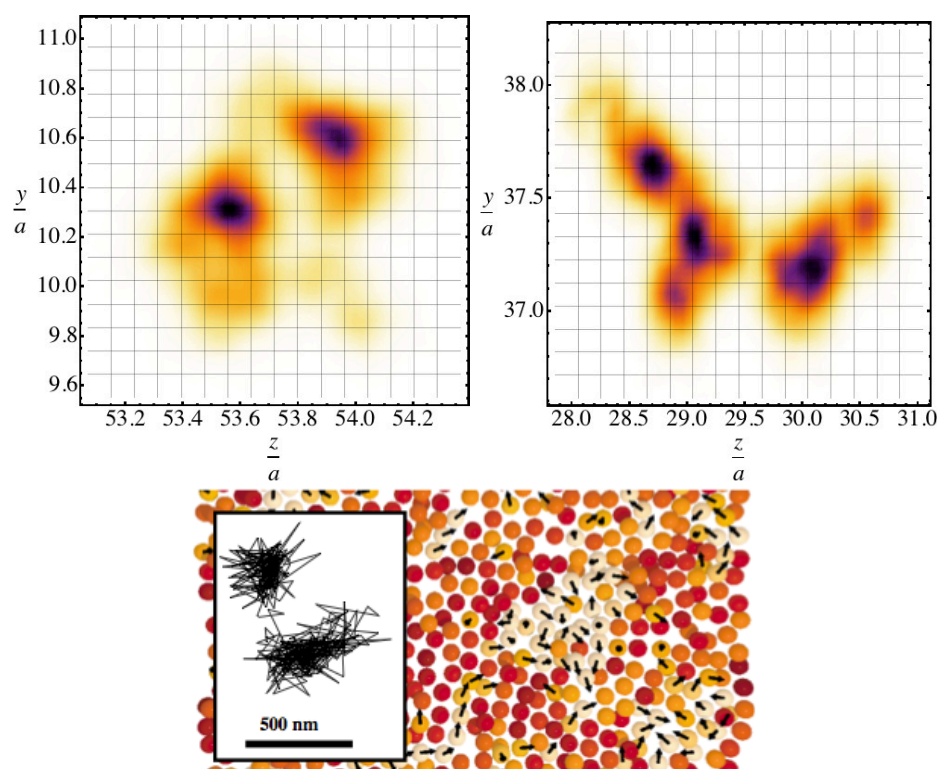


Figura 3.10: Arriba: Curvas de nivel para las trayectorias de dos partículas marcadas en el plano y - z para dos fracciones volumétricas distintas (izquierda $\phi = 0.0076$, derecha $\phi = 0.0168$). Las partículas son seguidas para un lapso de tiempo $\tau = 27400\tau_{\dot{\gamma}}$, del orden cuando α_2 es máximo (Fig. 3.9). Abajo: *caging* en la transición a vidrio (E. R. Weeks and D. A. Weitz [25]).

3.6.6. Régimen V: segundo movimiento difusivo

Después de varias colisiones del tipo hard-core, el movimiento de la partícula se vuelve difusivo a largos tiempos. El coeficiente de la auto-difusión en la dirección del gradiente de velocidades puede ser calculada para largos tiempos (típicamente $\tau_{\text{difusion}} \sim \tau_{\alpha_2}$) usando el cuadrado de los desplazamientos cuadráticos medios,

$$D_{yy}^{(2)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \Delta y(t)^2 \rangle. \quad (3.19)$$

En la figura 3.11 se presenta $D_{yy}^{(2)}$ en función de la fracción volumétrica de partículas. Como señaló Drazer *et al.* [15], al agregar una fuerza repulsiva de corto alcance al modelo, el coeficiente de difusión es proporcional al cuadrado de la fracción volumétrica de partículas. Esto es confirmado al ajustar los datos con una ley de potencias, lo que resulta en

$$D_{yy}^{(2)} = 1.9 \times 10^{-2} \dot{\gamma} a^2 \phi^2. \quad (3.20)$$

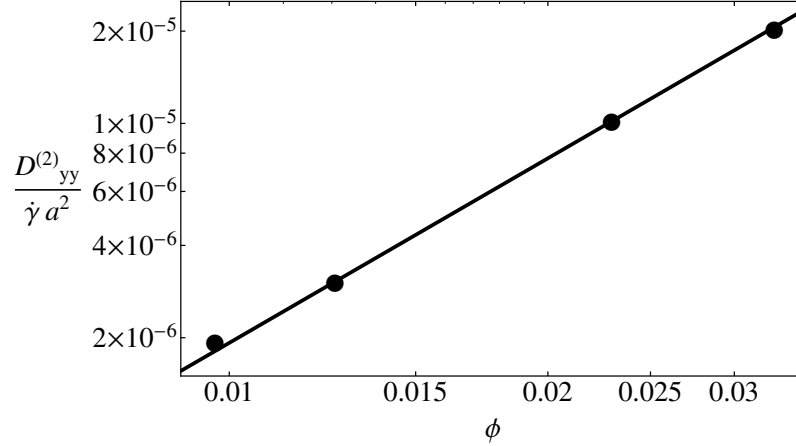


Figura 3.11: El coeficiente de autodifusión en la dirección del gradiente de velocidades $D_{yy}^{(2)}$ como función de la fracción volumétrica de partículas. La línea sólida es el resultado de un ajuste en leyes de potencia. Las barras de error son más pequeñas que los símbolos en el gráfico.

3.6.7. Validación de resultados

Se realizaron simulaciones con una fuerza repulsiva igual a cero ($f \rightarrow 0$), las que reprodujeron los primeros tres regímenes, confirmando que éstos son producidos

puramente por las interacciones hidrodinámicas. Para tiempos más largos, nuestro análisis en ausencia de una fuerza repulsiva no es definitivo, porque los encuentros cercanos eventualmente toman lugar a distancias mucho menores que el diámetro de la partícula. Sin fuerzas repulsivas, fuerzas de lubricación serían necesarias para prevenir los traslapes a un nivel puramente hidrodinámico. El coeficiente de difusión sería proporcional a ϕ^2 , como ha sido encontrado por otros autores.

Por otro lado, simulaciones con una fuerza repulsiva, pero sin interacción hidrodinámica no permiten una comparación directa, debido a que en el régimen diluido las partículas pueden viajar largas distancias en línea recta, con un desplazamiento nulo transversal.

3.7. Conclusiones

El análisis numérico de la auto-difusión inducida por el cizalle en suspensiones diluidas no-Brownianas a número de Reynolds igual a cero revela un rico comportamiento subdifusivo. El sistema consiste en una suspensión diluida monodispersa de partículas esféricas que interactúan hidrodinámicamente y con una fuerza repulsiva de corto alcance. La interacción hidrodinámica es modelada considerando la primera contribución multipolar que no es idénticamente cero (el *stresslet*) para capturar las interacciones de largo alcance. El análisis de los desplazamientos cuadráticos medios en la dirección del gradiente de velocidades nos permite identificar cinco regímenes, el último de éstos es difusivo. El potencial repulsivo de corto-alcance significa que el coeficiente de difusión en este régimen final es proporcional al cuadrado de la fracción volumétrica ϕ .

Los primeros regímenes son subdifusivos, y son producidos por las interacciones hidrodinámicas de a pares entre partículas. Aunque cada interacción hidrodinámica es reversible, por lo que no permite que haya migración a través de las líneas de flujos, la superposición incoherente de éstas producen un rápido crecimiento y más tarde un plateau en el desplazamiento cuadrático medio. Este plateau es más pronunciado en la dirección del gradiente de velocidades, pero es observable en la dirección de vorticidad. El tercer régimen es difusivo, con su origen en los desplazamientos producidos por las interacciones hidrodinámicas entre muchas partículas (al menos 3 esferas), las que rompen la reciprocidad. El coeficiente de difusión es proporcional a $\phi^{2.4}$, confirmando que el proceso difusivo es producido por las interacciones entre varias partículas.

Cuando consideramos un valor finito para la fuerza de repulsión, dos regímenes adicionales aparecen. Después del régimen difusivo producido por las interacciones

hidrodinámicas, una fuerte desviación de una distribución Gaussiana es observada. Este comportamiento no-Gaussiano es debido a las colisiones entre partículas que producen grandes migraciones en eventos discretos. El resultado es similar (aunque con un origen completamente distinto) a la migración entre cajas observada en los vidrios. Después de varios de estos eventos discretos, un nuevo régimen difusivo es alcanzado, el cual es el régimen final observado. Ajustes en leyes de potencia fueron utilizados para distintas cantidades (tiempos de residencia, tiempos de difusión o coeficientes de difusión) en términos de la fracción volumétrica ϕ de acuerdo con las explicaciones previas. Los exponentes no son exactamente los números enteros esperados, posiblemente debido a las interacciones entre varias partículas en el *stresslet*.

Capítulo 4

Suspensiones Activas

4.1. Resumen

En esta sección analizaremos las suspensiones mixtas diluidas. Es decir, las partículas en suspensión corresponden a partículas autopropulsadas, las que tienen tamaño definido, velocidad definida y a diferencia de las partículas pasivas, una ecuación adicional para la dirección en la que se orientan y nadan y, por otro lado, tenemos una suspensión de esferas pasivas con tamaño finito. Este tipo de suspensiones la analizaremos tomando un modelo para los nadadores tipo *E. coli*, el modelo corresponde a un nadador del tipo cascabel el que consta de dos esferas de distinto tamaño unidas por una barra sin peso ni roce. Este tipo de suspensión mixta será estudiado en dos casos, el primer caso, corresponde al en que las partículas y las bacterias difunden sólo por la acción de la actividad de las bacterias en suspensión y el segundo caso al que la suspensión está expuesta a un cizalle simple.

En el caso en que la suspensión no está expuesta a un flujo externo, la difusividad (coeficiente de difusión) de las esferas y las bacterias muestra un complejo comportamiento. Es observado que la difusividad de las esferas disminuye al aumentar la concentración de bacterias en la suspensión, en cambio, cuando se aumenta la concentración de esferas y se mantiene fijo el número de bacterias la difusividad aumenta al aumentar la concentración de esferas pero hasta cierta concentración límite de esferas $\phi_A^{limite} \sim 4.5 \times 10^{-5}$ desde donde la difusividad comienza a disminuir a medida que la concentración de esferas aumenta.

En el caso de las bacterias, el régimen difusivo es alcanzado rápidamente. Al variar la concentración de esferas pero manteniendo fijo el número de bacterias la difusividad de las bacterias disminuye hasta cierta concentración de esferas punto desde el cual la difusividad vuelve a aumentar. En cambio, al variar la concentración de bacterias

la difusividad de las bacterias muestra un crecimiento lineal con su concentración. Aplicar un cizalle simple en la suspensión. Permite que, en el caso de las bacterias, aumente por un lado la difusividad de éstas y la rapidez con la que comienza el régimen difusivo. En este caso la difusividad de las bacterias siempre aumenta, tanto como al variar la concentración de esferas y la concentración de bacterias, pero su crecimiento no es lineal sino más complejo. En el caso de las esferas pasivas, la presencia de un cizalle simple, desarrolla un comportamiento más complejo. Por un lado al variar la concentración de bacterias, se desarrolla un régimen difusivo a tiempos cortos pero luego un régimen superdifusivo $\sim \phi^{1.5}$ en la dirección del gradiente de velocidades, el que se extiende hasta que se vuelve a desarrollar un régimen difusivo. Mientras que en la dirección de vorticidad el régimen difusivo es alcanzado inmediatamente. Por otro lado, al variar la concentración de esferas en la dirección del gradiente de velocidades y en la dirección de vorticidad un régimen superdifusivo es desarrollado inicialmente, este régimen se extiende más allá de los tiempos de cálculo en las simulaciones realizadas por lo que no podrá ser analizado.

Este capítulo será organizado de la siguiente forma, en la sección 4.1 introduciremos a la bacteria *E. Coli*, en la sección 4.2 se da una introducción para suspensiones activas, en la sección 4.3 se presenta el teorema de la almeja, teorema fundamental para entender el nado recíproco de una bacteria. En la sección 4.4 se presenta el modelo de nadador tipo cascabel y las ecuaciones a utilizar en el problema. Más adelante se presentan los resultados y las conclusiones.

4.2. Introducción

La *Escherichia Coli* es un organismo unicelular compuesto de una célula que mide $1[\mu\text{m}]$ de ancho y entre $2\text{-}5[\mu\text{m}]$ de largo aproximadamente, la que consta además de seis filamentos, los que, cuando la bacteria avanza forman un moño que gira en contra las manecillas del reloj produciendo un movimiento helicoidal que ejerce una fuerza hacia atrás y permite el avance de la bacteria (*run*). Cuando la bacteria esta en reposo estos flagelos se estiran y la bacteria puede escoger otra dirección (*tumble*). La intermitencia de este *run and tumble* produce que la bacteria describa un movimiento tipo *random walk* en el fluido.

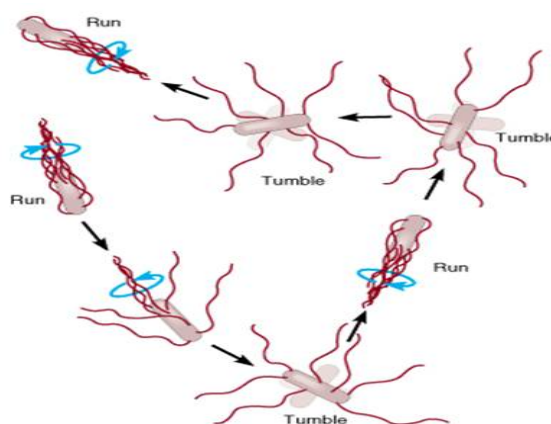


Figura 4.1: Esquema para la bacteria *Escherichia Coli* moviéndose en un fluido.

Las suspensiones activas a bajo número de Reynolds han sido tema de mucha relevancia durante los últimos años. El interés por modelar y simular estos nadadores van desde el estudio de la forma de optimizar la forma en que nadan [60, 61, 66] e interactúan estos nadadores [62, 64] hasta la formación de complejas estructuras debido a las interacciones que ocurren entre éstos. Una de las razones por la cual es interesante estudiar estos nadadores desde lo más básico, es decir la forma en que nadan, es que no es trivial nadar a bajo número de Reynolds. Debido a que las ecuaciones que describen el movimiento de un microorganismo a bajo número de Reynolds son las ecuaciones lineales de Stokes y estas ecuaciones, como vimos, son reversibles. Es por esto que las bacterias para avanzar efectivamente en el fluido deben romper la simetría en el movimiento que ejecutan. Dentro de los modelos utilizados para estudiar a las bacterias se encuentran modelos de esferas o partículas autopropulsadas, es decir que debido a la acción de un motor o de una fuerza ubicada en algún punto de ésta puede moverse libremente por el fluido, bacterias que oscilan y de esa forma pueden avanzar como el modelo de tres esferas utilizado por Pooley et al. [61], bacterias que se deforman [65, 66], bacterias con flagelos [59] o bacterias con brazos [70] entre muchas otras.

Más allá de estudiar cómo nadan o se mueven estos nadadores, también es interesante estudiar los cambios que éstos inducen en el fluido que los rodea debido a la presencia de esta suspensión. La viscosidad efectiva de la suspensión activa y el fluido se ve alterada cuando estas bacterias son expuestas a un cizalle simple, y el cambio en la viscosidad depende de la orientación que eligen las bacterias al moverse en el fluido [31, 34] así como de la forma en que nadan las bacterias. Por otro lado debido a las interacciones es posible la formación de estructuras espacio temporales

más complejas en el fluido como remolinos, orientación colectiva, nado colectivo y jets [67–69] por nombrar algunas, las que se observan tanto experimentalmente como teóricamente. Teóricamente estas suspensiones se pueden estudiar con distintos enfoques, por un lado están las teorías como un medio continuo efectivo en donde las bacterias son estudiadas sin la acción de un flujo externo mediante ecuaciones que modelan hidrodinámicamente su orientación colectiva [32, 73] dejando fuera la acción de las interacciones cercanas entre bacterias. Por otro lado, también se encuentran las simulaciones tipo dinámica Stokesiana en donde las bacterias son simuladas como dipolos de fuerza, con distintos modelos para describir la forma y tamaño de las bacterias, pero utilizando que su interacción hidrodinámica es de largo alcance [71, 72]. En este último caso las interacciones cercanas entre bacterias toman importancia, sobre todo en suspensiones muy densas de bacterias, y modelar estas interacciones ha llevado a utilizar distintos modelos como potenciales del tipo Lennard-Jones [34] o volúmenes excluidos [62, 71].

En las suspensiones mixtas, es decir de esferas pasivas y bacterias, el movimiento de los nadadores crea agitación en el fluido. Esta agitación puede ser visualizada observando las partículas pasivas como marcadores. El movimiento inducido por las bacterias muestra difusión anómala [35, 36] y después de largos tiempos, cerca de las paredes, el movimiento inducido es difusivo con coeficiente de difusión proporcional a la concentración de materia activa y su velocidad media [37]. También, las interacciones hidrodinámicas representadas por esta agitación actúan como ruido auto-inducido [34] para las bacterias.

4.3. Teorema de la almeja

Nadar a bajo número de Reynolds no es algo trivial de hacer. A Reynolds distinto de cero, para nadar, sólo basta que se mantenga una deformación cíclica y que básicamente uno se mueva todo el tiempo. A bajo número de Reynolds tenemos el llamado nado recíproco, es decir me deformedo a una cierta forma y luego vuelvo a la forma original haciendo la misma secuencia en reversa sin lograr un desplazamiento neto. No me muevo, debido a que a bajo número de Reynolds los movimientos son reversibles en el tiempo. Entonces al realizar un movimiento cíclico todo lo que avanzo lo retrocedo. Un buen ejemplo para este tipo de nado es el realizado por una almeja, la que no podría nadar a bajo número de Reynolds debido a que tiene sólo un grado de libertad y puede efectuar sólo un movimiento que es reversible, abrir y cerrar, es decir realiza el mismo movimiento hacia adelante y hacia atrás tomando el camino inverso. Por lo tanto, cualquier estrategia para nadar a Reynolds cero debe incluir un

movimiento cíclico no reversible en el tiempo. Ejemplos de este tipo de nadadores, en la naturaleza, incluyen a los espermatozoides, la *Escherichia coli*, algunas algas, etc [70].

4.4. Modelo de bacterias

En esta sección nos enfocaremos en estudiar el modelo para una bacteria tipo cascabel. Para esto debemos escribir las ecuaciones para el caso de una bacteria moviéndose en un flujo externo. Dado el modelo a desarrollar (tipo cascabel) las ecuaciones pueden estar escritas relativas al centro geométrico del nadador o a su centro hidrodinámico. Luego, estudiaremos la interacción esfera-bacteria y deduciremos las ecuaciones para simular las interacciones en caso de tener una suspensión diluida de esferas y bacterias.

4.4.1. Nadador tipo cascabel

Debido que la bacteria que queremos reproducir es la *E. coli*, ésta la podemos describir como si estuviese formada de dos partes, por un lado el cuerpo de la bacteria, el que llamaremos cabeza y por otro lado el moño, el que llamaremos cola. Por esto, consideremos un nadador tipo cascabel [48] que consiste en dos esferas de radios distintos, una de radio R_H , que corresponde a la cabeza del nadador, y otra de radio R_T que corresponde a la cola del nadador. Cabeza y cola se encuentran unidas por una barra libre de roce y de masa de largo L , el centro hidrodinámico del nadador gira con velocidad $\vec{\Omega}$ como un sólido rígido. En la cola del nadador se encuentra un pequeño motor, que ejerce sobre el fluido una fuerza $\vec{F}_0 = F_0 \hat{n}$ y es el mecanismo por el cual el nadador se autopropulsa, en donde \hat{n} corresponde a un vector normal que le da la orientación a la bacteria y se define como $\hat{n} = \frac{\vec{r}_H - \vec{r}_T}{L}$, donde \vec{r}_H es la posición en la que se encuentra la cabeza y \vec{r}_T la posición de la cola.

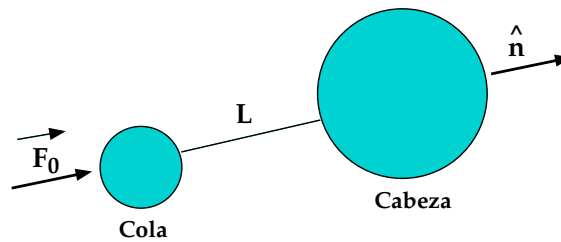


Figura 4.2: Esquema para la bacteria tipo cascabel.

El tamaño de la cabeza R_H , la cola R_T y largo de la bacteria L serán elegidos constantes. Para simplificar el modelo de la bacteria asumiremos que ésta no realiza un movimiento del tipo *run and tumble*.

Asumiremos que el nadador se encuentra en equilibrio mecánico, por lo que la suma de fuerzas y de torques sobre él es idénticamente nula, ie,

$$\vec{F}_H + \vec{F}_T = 0 \quad (4.1)$$

$$\vec{\tau}_H + \vec{\tau}_T = 0 \quad (4.2)$$

Calculando la fuerza que ejerce el fluido en cada esfera, mediante la ley de Stokes (1851) $\vec{F}^{\text{Hidro}} = -6\pi\eta R_{H,T} \vec{U}_{H,T}$, en la posición de la cabeza y la cola

$$\vec{F}_H = -6\pi\eta R_H (\vec{V}_H - \vec{u}^H(\vec{r}_H)) \quad (4.3)$$

$$\vec{F}_T = -6\pi\eta R_T (\vec{V}_T - \vec{u}^T(\vec{r}_T)) + \vec{F}_0 \quad (4.4)$$

Donde, la fuerza propulsora \vec{F}_0 es agregada en la cola de la bacteria debido a que ésta nada como un *pusher*. En la ecuación anterior \vec{V}_H es la velocidad lineal de la cabeza, \vec{V}_T es la velocidad de la cola y \vec{u} es la velocidad del fluido evaluado en la posición en la que se encuentra la cabeza y la cola respectivamente. Considerando la cabeza y la cola de las bacterias como monopolos de fuerza ubicados en las posiciones \vec{r}_H y \vec{r}_T la solución de la ecuación de Stokes para un monopolo de fuerzas ejerciendo una fuerza puntual \vec{F} en esa posición es $\vec{U} = -\frac{\mathbf{G}(\vec{r})}{8\pi\eta} \cdot \vec{F}$, por lo tanto

$$\vec{u}^H(\vec{r}) = -\frac{\mathbf{G}(\vec{r} - \vec{r}_T)}{8\pi\eta} \cdot \vec{F}_T|_{SH} + \vec{u}^\infty(\vec{r}_H) \quad (4.5)$$

$$\vec{u}^T(\vec{r}) = -\frac{\mathbf{G}(\vec{r} - \vec{r}_H)}{8\pi\eta} \cdot \vec{F}_H|_{ST} + \vec{u}^\infty(\vec{r}_T) \quad (4.6)$$

Con \vec{u}^∞ la velocidad lejos de la bacteria y $\mathbf{G} = (\frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}}{r^3})$ el tensor de Oseen. Notemos que el tensor de Oseen en el caso en que lo medimos en la dirección $\vec{r}_H - \vec{r}_T$ se puede escribir como

$$\mathbf{G}(\vec{r}_H - \vec{r}_T) = \frac{1}{L} (\mathbf{I} + \hat{n}\hat{n}) \quad (4.7)$$

La velocidad del fluido debido a la presencia de la cabeza se calcula como si existiera una singularidad en la posición de la cola con fuerza \vec{F}_T y la velocidad del fluido debido a la presencia de la cola se calcula como si existiera una singularidad en la posición de la cabeza con fuerza \vec{F}_H .

La condición de que la bacteria sea un sólido rígido, implica que

$$(\vec{\Omega}_H - \vec{\Omega}_T) \times \hat{n} = 0 \quad (4.8)$$

Por lo que podemos escribir,

$$\vec{\Omega}_H = \vec{\Omega}_T = \vec{\Omega} \quad (4.9)$$

donde $\vec{\Omega}_{H,T}$ corresponden a la velocidad ángular de la cabeza y la cola respectivamente. Luego los torques en la cabeza y la cola se pueden escribir como,

$$\vec{\tau}_H = -8\pi\eta R_H^3 \left(\vec{\Omega} - \frac{1}{2} \vec{\nabla} \times \left(-\frac{\mathbf{G}(\vec{r} - \vec{r}_T)}{8\pi\eta} \cdot \vec{F}_T|_{SH} + \vec{u}^\infty(\vec{r}_H) \right) \right) \quad (4.10)$$

$$\vec{\tau}_T = -8\pi\eta R_T^3 \left(\vec{\Omega} - \frac{1}{2} \vec{\nabla} \times \left(-\frac{\mathbf{G}(\vec{r} - \vec{r}_H)}{8\pi\eta} \cdot \vec{F}_H|_{ST} + \vec{u}^\infty(\vec{r}_T) \right) \right) \quad (4.11)$$

donde $\vec{\Omega} \perp \hat{n}$, es decir las esferas no giran con respecto al eje de simetría del nadador. Utilizando las ecuaciones (4.2) y las ecuaciones para la fuerza y el torque en la cabeza y cola, podemos reescribir la condición de equilibrio mecánico como

$$0 = \frac{F_0 \hat{n}}{6\pi\eta} \left(1 - \frac{3R_H}{2L} \right) - R_H(\vec{V}_H - \vec{u}_H^\infty) - R_T(\vec{V}_T - \vec{u}_T^\infty) \quad (4.12)$$

$$+ \frac{3R_H R_T}{4L} \mathbf{G}(\vec{r}_T - \vec{r}_H)(\vec{V}_H - \vec{u}_H^\infty + \vec{V}_T - \vec{u}_T^\infty) \quad (4.13)$$

$$0 = -(R_H^3 + R_T^3) \vec{\Omega} + 3\pi\eta R_H^3 R_T \vec{\nabla} \times \mathbf{G}(\vec{r}_T - \vec{r}_H) \cdot (\vec{V}_T - \vec{u}_T^\infty) \quad (4.14)$$

$$+ 3\pi\eta R_T^3 R_H \vec{\nabla} \times \mathbf{G}(\vec{r}_T - \vec{r}_H) \cdot (\vec{V}_H - \vec{u}_H^\infty) \quad (4.15)$$

$$+ \frac{R_T^3}{2} \vec{\nabla} \times \vec{u}_T^\infty + \frac{R_H^3}{2} \vec{\nabla} \times \vec{u}_H^\infty \quad (4.16)$$

Estas ecuaciones se pueden simplificar cuando ya no miramos a la partícula como una cabeza y una cola sino más bien como un objeto rígido. Para estudiar este nadador podemos recurrir al centro geométrico del nadador o a su centro hidrodinámico.

4.5. Ecuaciones escritas desde el centro geométrico

Calculemos la velocidad lineal y angular del nadador respecto del centro geométrico, definido como:

$$\vec{r}_{cm} = \frac{\vec{r}_H + \vec{r}_T}{2} \quad (4.17)$$

Usando que $\vec{r}_H - \vec{r}_T = L\hat{n}$,

$$\vec{r}_H = \vec{r}_{cm} + \frac{L}{2} \hat{n}$$

$$\vec{r}_T = \vec{r}_{cm} - \frac{L}{2} \hat{n}$$

Con esta definición podemos escribir la velocidad lineal en la cabeza y la cola del nadador.

$$\begin{aligned}\vec{V}_H &= \vec{V}_{cm} + \vec{\Omega} \times \frac{L}{2} \hat{n} \\ \vec{V}_T &= \vec{V}_{cm} - \vec{\Omega} \times \frac{L}{2} \hat{n}\end{aligned}$$

Reemplazando en las ecuaciones (4.2-4.6) y considerando un cizalle externo de la forma $\mathbf{E}^\infty \vec{r}$, y usando $(\vec{\Omega} \times \hat{n}) = \dot{\hat{n}}$.

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{I} - \frac{3R_H R_T}{4R_m L} \mathbf{G}\right) (\vec{V}_{cm} - \vec{u}_{cm}^\infty) &= \frac{F_0 \hat{n}}{12\pi\eta R_m} \left(1 - \frac{3R_H}{2L}\right) \\ &+ \frac{(R_T - R_H)L}{4R_m} (\dot{\hat{n}} - \mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n})\end{aligned}\quad (4.18)$$

Con $R_m = (R_H + R_T)/2$ el promedio de los radios.

Reemplazando en (4.11) podemos obtener una ecuación para la velocidad angular escrita respecto del centro geométrico

$$\begin{aligned}\vec{\Omega} &= \frac{\frac{3R_H R_T}{8L^2} (R_H^2 + R_T^2) \vec{\nabla} \times \mathbf{G} \cdot (\vec{V}_{cm} - \vec{u}_{cm}^\infty) + \left(\frac{R_H^3 + R_T^3}{2}\right) \vec{\nabla} \times \vec{u}_{cm}^\infty}{R_H^3 + R_T^3 + \frac{3R_H R_T}{8L} (R_T^2 - R_H^2)} \\ &- \frac{\frac{3R_H R_T (R_T^2 - R_H^2)}{8L^2} (\vec{\nabla} \times \mathbf{G}) \mathbf{E}^\infty \cdot \frac{L}{2} \hat{n}}{R_H^3 + R_T^3 + \frac{3R_H R_T}{8L} (R_T^2 - R_H^2)}\end{aligned}\quad (4.19)$$

La ecuación de movimiento para la velocidad lineal, en este caso, viene dado por la ecuación (4.19) mientras que la variación angular viene dada por (4.20).

4.6. Ecuaciones escritas desde el centro hidrodinámico

Definiendo el centro hidrodinámico \vec{r}_c de la bacteria,

$$\vec{r}_c = \frac{R_H \vec{r}_H + R_T \vec{r}_T}{R_H + R_T}\quad (4.20)$$

Utilizando esta definición podemos entonces escribir las posiciones y las veloci-

dades de la cabeza y la cola en términos del centro hidrodinámico de la bacteria.

$$\vec{r}_T = \vec{r}_c - \frac{R_H}{2R_m} L \hat{n} \quad (4.21)$$

$$\vec{r}_H = \vec{r}_c + \left(1 - \frac{R_H}{2R_m}\right) L \hat{n} \quad (4.22)$$

$$\vec{V}_T = \vec{V}_c - \frac{R_H}{2R_m} L \vec{\Omega} \times \hat{n} \quad (4.23)$$

$$\vec{V}_H = \vec{V}_c + \left(1 - \frac{R_H}{2R_m}\right) L \vec{\Omega} \times \hat{n} \quad (4.24)$$

Reemplazando en las ecuaciones (4.2-4.6) y considerando un cizalle externo de la forma $\mathbf{E}^\infty \vec{r}$, y usando $(\vec{\Omega} \times \hat{n}) = \dot{\hat{n}}$.

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{I} - \frac{3R_H R_T}{4R_m L} \mathbf{G}\right) (\vec{V}_c - \vec{u}_c^\infty) &= \frac{F_0 \hat{n}}{12\pi\eta R_m} \left(1 - \frac{3R_H}{2L}\right) \\ &+ \frac{3R_H R_T}{8R_m} \left(1 - \frac{R_H}{R_m}\right) \mathbf{G}(\dot{\hat{n}} - \mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n}) \end{aligned} \quad (4.25)$$

y la velocidad angular,

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} &= \frac{\frac{3R_H R_T}{8L^2} (R_H^2 + R_T^2) \vec{\nabla} \times \mathbf{G} \cdot (\vec{V}_c - \vec{u}_c^\infty) + \left(\frac{R_H^3 + R_T^3}{2}\right) \vec{\nabla} \times \vec{u}_c^\infty}{R_H^3 + R_T^3 + \frac{3R_H R_T}{8LR_m} (R_T^3 - R_H^3)} \\ &- \frac{\frac{3R_H R_T (R_T^3 - R_H^3)}{8L^2 R_m} \vec{\nabla} \times \mathbf{G} \mathbf{E}^\infty \cdot \frac{L}{2} \hat{n}}{R_H^3 + R_T^3 + \frac{3R_H R_T}{8LR_m} (R_T^3 - R_H^3)} \end{aligned} \quad (4.26)$$

Cuando calculamos $\vec{\Omega}$ en ambos casos el rotor del tensor de Oseen $(\vec{\nabla} \times \mathbf{G} \cdot \vec{w})_i = \epsilon_{ijk}(-(\delta_{kl}n_j - \delta_{kj}n_l - \delta_{jl}n_k) - 3n_k n_l n_j)w_l$. Si ahora reemplazamos

$$\begin{aligned} \vec{V}_{cm} &= \vec{V}_c + \frac{L}{2} \left(1 - \frac{R_H}{R_m}\right) \dot{\hat{n}} \\ \vec{u}_{cm}^\infty &= \vec{u}_c^\infty + \frac{L}{2} \left(1 - \frac{R_H}{R_m}\right) \mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n} \end{aligned}$$

en (4.13-4.15) y usamos además que $\vec{\nabla} \times \mathbf{G}(\Omega \times \hat{n}) = -2\vec{\Omega}$ volvemos a obtener la velocidad angular respecto del centro hidrodinámico, es decir la expresión (4.20) para la velocidad angular. Esto es correcto debido a que hemos considerado a la

bacteria como un sólido rígido, es decir rota de la misma forma, independientemente desde donde se mida

$$\vec{\Omega}_{cm} = \vec{\Omega}_c$$

Supongamos que el nadador es sometido a un cizalle simple de la forma $\vec{u}^\infty = \dot{\gamma}y\hat{x}$, si escribimos el cizalle y la velocidad lineal del nadador en términos de la componente normal \hat{n} y tangencial \hat{t} :

$$\vec{V}_c = V_0\hat{n} + \vec{V}_t \quad (4.27)$$

$$\vec{u}_c^\infty = \dot{\gamma}y_c(\hat{n} \cos \alpha - \hat{t} \sin \alpha) \quad (4.28)$$

Además usaremos que $\mathbf{G}\vec{\omega} = \vec{\omega}_t + 2\omega\hat{n}$, reemplazando en la ecuación anterior

$$\begin{aligned} \vec{V}_c - \vec{u}_c^\infty &= \frac{F_0\hat{n}}{12\pi\eta R_m} \frac{(1 - \frac{3R_H}{2L})}{(1 - \frac{3R_H R_T}{2R_m L})} \\ &+ \frac{3R_H R_T}{8R_m} \left(1 - \frac{R_H}{R_m}\right) \left(\frac{\dot{\hat{n}} - (\mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n})_t}{(1 - \frac{3R_H R_T}{4R_m L})} - \frac{(\mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n})_n}{(1 - \frac{3R_H R_T}{2R_m L})} \right) \end{aligned} \quad (4.29)$$

Hasta esta ecuación tenemos la descripción completa del movimiento de la bacteria, notemos que en la ecuación anterior tenemos la variación de la velocidad lineal de la bacteria, en donde el primer término que aparece es la velocidad de autopropulsión de la bacteria $\vec{V}_0 = V_0\hat{n}$ y el segundo término corresponde a una velocidad lineal tangente a la dirección de orientación de la bacteria.

$$V_0 = \frac{F_0\hat{n}}{12\pi\eta R_m} \frac{(1 - \frac{3R_H}{2L})}{(1 - \frac{3R_H R_T}{2R_m L})}$$

Cuando las bacterias son sometidas a un gradiente de velocidades, éstas se mueven periódicamente en órbitas características dadas por la ecuación de Jeffery [46] que se presenta a continuación,

$$\dot{\hat{n}} = (\mathbf{I} - \hat{n}\hat{n})[\beta\mathbf{E}^S + \mathbf{E}^{AS}]\hat{n}. \quad (4.30)$$

Aquí \mathbf{E}^S y \mathbf{E}^{AS} son la parte simétrica y antisimétrica del tensor gradiente de velocidades $\mathbf{E} = \nabla\vec{v}$ y β es el llamado parámetro geométrico del nadador. Casos límites para el parámetro geométrico son $\beta = 1$ para un cuerpo infinitamente elongado, $\beta = 0$ para una esfera y $\beta = -1$ para un cuerpo parecido a un disco. Para encontrar el parámetro geométrico β de la bacteria, necesitamos comparar la ecuación de

movimiento del vector director con la ecuación de Jeffery [46] . Para esto usaremos además que $\vec{\nabla} \times \mathbf{G}\omega\hat{n} = 0$, luego

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{G}(\vec{V}_c - \vec{u}_c^\infty) = \frac{3R_H R_T}{8R_m} \left(1 - \frac{R_H}{R_m}\right) \left(\frac{\vec{\nabla} \times \mathbf{G}(\dot{\hat{n}} - (\mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n})_t)}{\left(1 - \frac{3R_H R_T}{4R_m L}\right)} \right)$$

Finalmente si reemplazamos esta expresión en la ecuación para la velocidad angular debemos resolver una ecuación de la forma:

$$\vec{\Omega} \times \hat{n} = a(\vec{\nabla} \times \vec{u}_c^\infty) \times \hat{n} - b(\vec{\nabla} \times \mathbf{G}(\mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n})_t) \times \hat{n} \quad (4.31)$$

Si expandimos la ecuación de Jeffery tenemos, para la componente i -ésima

$$\dot{\hat{n}}_i = \left(\left(\frac{\beta}{2} + \frac{\gamma}{2} \right) E_{ik}^\infty + \left(\frac{\beta}{2} - \frac{\gamma}{2} \right) E_{ki}^\infty \right) n_k - \beta n_i n_k E_{kp}^\infty n_p \quad (4.32)$$

Por otra parte si desarrollamos la ecuación (4.32) por partes tenemos:

$$\begin{aligned} a((\vec{\nabla} \times \vec{u}_c^\infty) \times \hat{n})_i &= a\epsilon_{ijk}(\epsilon_{jlm}E_{ml}^\infty)n_k \\ &= -a\epsilon_{jik}\epsilon_{jlm}E_{ml}^\infty n_k \\ &= a(\delta_{im}\delta_{kl} - \delta_{il}\delta_{kl})E_{ml}^\infty n_k \\ &= a(E_{ik}^\infty n_k - E_{ki}^\infty n_k) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b((\vec{\nabla} \times \mathbf{G}(\mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n})_t) \times \hat{n})_i &= b\epsilon_{jik}\epsilon_{jlm}(\delta_{mp}n_l - \delta_{ml}n_p - \delta_{lp}n_m + 3n_m n_p n_l) \\ &\quad (\delta_{pq} - n_p n_q)(E^\infty \cdot \hat{n})_p n_k \\ &= b(\delta_{im}\delta_{kl} - \delta_{il}\delta_{kl})(\delta_{mp}n_l - \delta_{ml}n_p - \delta_{lp}n_m \\ &\quad + 3n_m n_p n_l)(\delta_{pq} - n_p n_q)(E^\infty \cdot \hat{n})_p n_k \\ &= 2bn_i n_k E_{kp}^\infty n_p - 2bE_{ik}^\infty n_k \end{aligned}$$

Entonces,

$$\dot{\hat{n}}_i = a(E_{ik}^\infty n_k - E_{ki}^\infty n_k) - 2bn_i n_k E_{kp}^\infty n_p + 2bE_{ik}^\infty n_k \quad (4.33)$$

Comparando (4.30) y (4.33), tenemos:

$$\begin{aligned} a + 2b &= \frac{\beta}{2} + \frac{\gamma}{2} \\ -a &= \frac{\beta}{2} - \frac{\gamma}{2} \\ -2b &= -\beta \end{aligned}$$

Luego, $\beta = 2b$ y $\gamma = 2(a + b)$, reemplazando a y b obtenemos que,

$$\gamma = 1$$

$$\beta = \frac{\frac{3R_H R_T}{8R_m L} \left((R_T^3 - R_H^3)L + \frac{3R_H R_T}{4} (R_H^2 + R_T^2) \left(1 - \frac{R_H}{R_m} \right) \right)}{R_H^3 + R_T^3 + \frac{3R_H R_T}{8R_m L} \left((R_T^3 - R_H^3)L + \frac{3R_H R_T}{4} (R_H^2 + R_T^2) \left(1 - \frac{R_H}{R_m} \right) \right)} \quad (4.34)$$

Que $\gamma = 1$, nos entrega que efectivamente la ecuación de Jeffery (4.30) es equivalente a una ecuación para la velocidad angular del nadador.

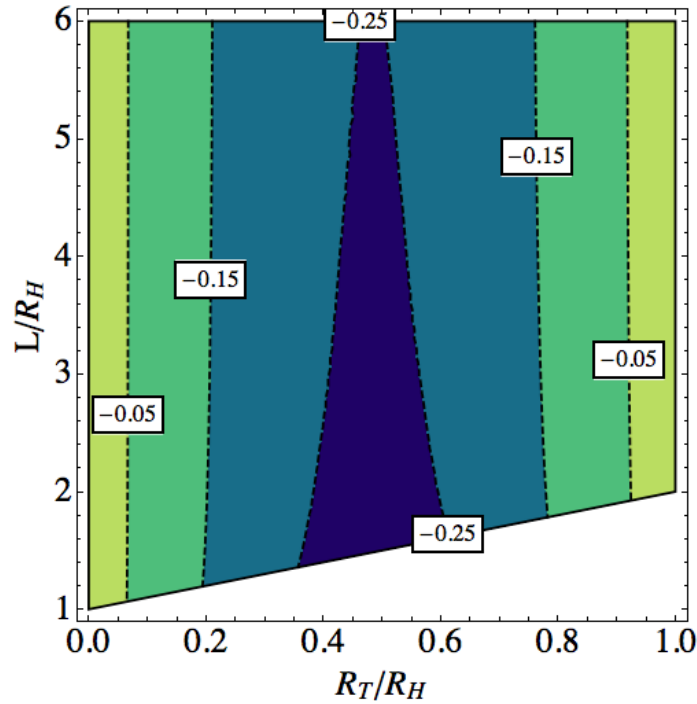


Figura 4.3: Curvas de nivel para β como función de R_T/R_H y L/R_H .

En la figura 4.3 podemos observar que para este modelo de bacteria tipo cascabel el parametro geométrico β siempre es menor que cero, lo que nos da cuenta de un nadador que se mueve angularmente parecido a un disco.

El dipolo de fuerzas que ejerce la bacteria en el fluido se define como $\sigma = \sigma_0 \hat{n} \hat{n}$ y tiene una intensidad constante dada por σ_0 , que llamaremos dipolo permanente, la que como vimos anteriormente es menor que cero en el caso en que los nadadores nadan desde la cola (*pusher*) y es mayor que cero en el caso en que la bacteria nada desde la cabeza (*puller*). El dipolo permanente para este modelo de bacterias es

posible calcularlo de una forma similar a la que se utilizó para encontrar el parámetro geométrico β . Este viene dado por

$$\sigma_0 = F_0 L \frac{1}{\frac{R_H + R_T}{2R_H} - \frac{3R_T}{2L}} \quad (4.35)$$

Por lo que el dipolo permanente depende de la geometría del nadador y de la intensidad de la fuerza propulsora. En la figura 4.4 mostramos un mapa de colores para la intensidad del dipolo dependiendo de los valores geométricos que elijamos, todos los valores para el dipolo permanente están en el mismo orden de magnitud.

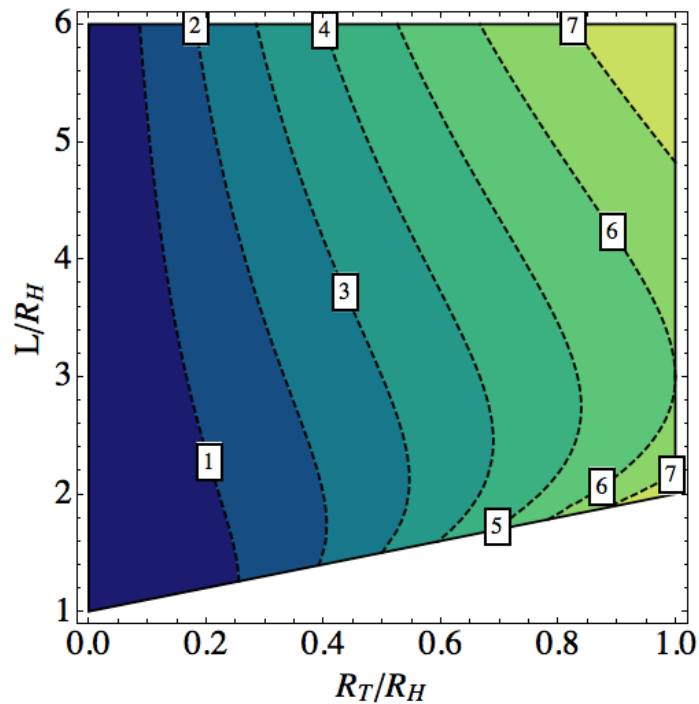


Figura 4.4: Curvas de nivel para σ_0 como función de R_T/R_H y L/R_H . Para $F_0 = 1$.

En resumen las ecuaciones que se utilizan para este nadador tipo cascabel escritas respecto de su centro hidrodinámico son,

$$\begin{aligned}
\sigma_0 &= \frac{F_0 L}{\frac{R_H + R_T}{2R_H} - \frac{3R_T}{2L}} \hat{n} \hat{n} \\
\beta &= \frac{\frac{3R_H R_T}{8R_m L} \left((R_T^3 - R_H^3)L + \frac{3R_H R_T}{4} (R_H^2 + R_T^2) \left(1 - \frac{R_H}{R_m}\right) \right)}{R_H^3 + R_T^3 + \frac{3R_H R_T}{8R_m L} \left((R_T^3 - R_H^3)L + \frac{3R_H R_T}{4} (R_H^2 + R_T^2) \left(1 - \frac{R_H}{R_m}\right) \right)} \\
\dot{\hat{n}} &= (\mathbf{I} - \hat{n} \hat{n}) [\beta \mathbf{E}^S + \mathbf{E}^{AS}] \hat{n} \\
\vec{V}_c - \vec{u}_c^\infty &= \frac{F_0 \hat{n}}{12\pi\eta R_m} \frac{\left(1 - \frac{3R_H}{2L}\right)}{\left(1 - \frac{3R_H R_T}{2R_m L}\right)} \\
&\quad + \frac{3R_H R_T}{8R_m} \left(1 - \frac{R_H}{R_m}\right) \left(\frac{\dot{\hat{n}} - (\mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n})_t}{\left(1 - \frac{3R_H R_T}{4R_m L}\right)} - \frac{(\mathbf{E}^\infty \cdot \hat{n})_n}{\left(1 - \frac{3R_H R_T}{2R_m L}\right)} \right)
\end{aligned}$$

4.7. Interacciones Hidrodinámicas

Las interacciones hidrodinámicas entre bacterias son de la misma forma que las interacciones entre partículas pasivas, es decir, es una interacción de largo alcance. La diferencia principal radica en que ahora el dipolo de fuerzas es negativo para nadadores del tipo *pusher*. Esta diferencia produce que el flujo que provocan los nadadores tipo *pusher* es repulsivo en la dirección \hat{n} cerca del nadador y atractivo en la dirección ortogonal (ver figura 4.5). Es por esto que es necesario incluir nuevamente una fuerza repulsiva de corto alcance entre nadadores. Dentro de las fuerzas de repulsión se encuentran los modelos tipo Lennard-Jones [31] o de volumen excluido [32, 62]. En este trabajo utilizaremos una fuerza repulsiva de corto alcance tanto para las interacciones cercanas del tipo esfera-bacteria, esfera-esfera y bacteria-bacteria. La fuerza repulsiva de corto alcance es semejante a la utilizada en la sección 3.5.

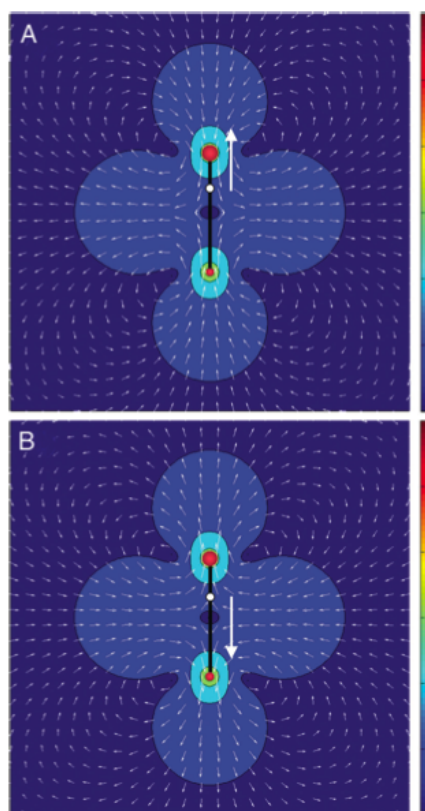


Figura 4.5: Nadadores tipo cascabel. A: Un nadador del tipo contráctil, es decir, tipo puller. B: Un nadador del tipo extensible, es decir, del tipo *pusher*. Figura tomada de Aparna Baskaran and M. Cristina Marchetti [62].

Las interacciones hidrodinámicas del tipo bacteria-bacteria ha sido largamente estudiadas [62, 64, 72], por lo que no las reproduciremos en este capítulo. Pero sí nos enfocaremos en observar las interacciones hidrodinámicas del tipo esfera-bacteria en el volumen. Cuando una bacteria pasa cerca de una esfera, la esfera recibe una perturbación en el fluido que la rodea, esta perturbación es reversible como esperaríamos (fig. 4.6). La esfera se siente inicialmente atraída hacia la bacteria, cuando ésta pasa justo sobre el centro de la esfera la empuja hacia abajo y luego al pasar la vuelve a atraer hacia ella dejándola nuevamente en la línea de flujo que la esfera tenía inicialmente. Por lo que estas interacciones siguen siendo reversibles, como era de esperar en el régimen de Stokes.

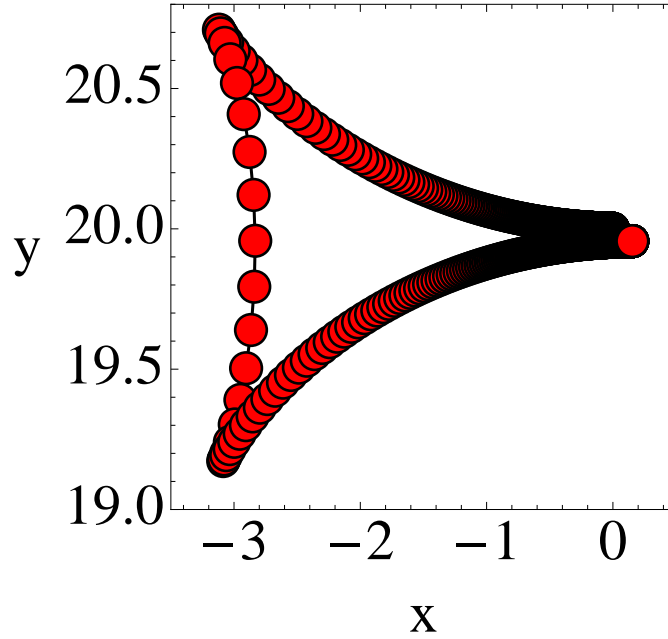


Figura 4.6: Esfera, moviéndose por la acción de el paso de una bacteria de izquierda a derecha desde $-\infty$ a $+\infty$.

Cuando agregamos más bacterias en la suspensión estas interacciones hidrodinámicas reversibles se volverán irreversibles permitiendo que las esferas migren de una a otra línea de flujo, lo que se desencadenará, como esperaríamos, más tarde en un régimen difusivo.

4.8. Ecuaciones de movimiento

Considerando una suspensión de NA esferas y NB bacterias en el volumen, sin presencia de paredes, tomando a las partículas esféricas como dipolos de fuerza (ver sección 3.4) y a las bacterias como dipolos de fuerza permanentes ubicados en la posición \vec{r}_b . La velocidad del fluido, producido por las esferas y las bacterias es:

$$\begin{aligned}
 u_i^{\text{fluido}}(\vec{r}) &= u_i^{\infty}(\vec{r}) + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_n^{NA} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r} - \vec{r}_n) d_{kj}^{Sn} \\
 &\quad + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_b^{NB} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r} - \vec{r}_b) \sigma_0 \hat{n}_k^b \hat{n}_j^b
 \end{aligned}$$

En donde \vec{r}_b corresponde a la posición del centro hidrodinámico de la bacteria b y $\mathbf{G}_{ij,k}$ es un tensor del tercer orden y corresponde al gradiente del tensor de Oseen.

$$\mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{r^3} (\delta_{ij}x_k - \delta_{ik}x_j - \delta_{kj}x_i) - 3\frac{x_ix_jx_k}{r^5}$$

donde $x_i = (\vec{r} - \vec{r}')_i$.

Por lo que la velocidad para la partícula n -ésima es:

$$\begin{aligned} u_i^{\text{esfera}}(\vec{r}_n) &= u_i^\infty(\vec{r}_n) + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{m \neq n}^{NA} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r}_m - \vec{r}_n) d_{kj}^{Sm} \\ &\quad + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_b^{NB} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r}_n - \vec{r}_b) \sigma_0 \hat{n}_k^b \hat{n}_j^b \end{aligned}$$

la velocidad de la bacteria b -ésima es:

$$\begin{aligned} u_i^{\text{bacteria}}(\vec{r}_{n_b}) &= V_{0i} + V_{ti} + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_n^{NA} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r}_{n_b} - \vec{r}_n) d_{kj}^{Sm} \\ &\quad + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{n_b \neq m_b}^{NB} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r}_{n_b} - \vec{r}_{m_b}) \sigma_0 \hat{n}_k^{m_b} \hat{n}_j^{m_b} \end{aligned}$$

con V_{0i} la componente i -ésima de la velocidad completa en la dirección normal \hat{n} y V_{ti} la componente i -ésima de la velocidad completa en la dirección tangente \hat{t} . El dipolo total de una esfera lo calculamos,

$$\begin{aligned} d_{kj}^{Sn} &= \frac{20\pi\eta a^3}{3} \left(E^{\infty S} + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{m \neq n} \mathbf{G}_{jl,pk}^S(\vec{r}_n - \vec{r}_m) d_{pl}^{Sm} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_b \mathbf{G}_{jl,pk}^S(\vec{r}_n - \vec{r}_b) \sigma_0 \hat{n}_p^b \hat{n}_l^b \right) \end{aligned}$$

Aquí a es el radio de la esfera, σ_0 es la magnitud del dipolo permanente de la bacteria y $\mathbf{G}_{jl,pk}^S(\vec{r})$ es la parte simétrica de un tensor de cuarto orden dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{jl,pk}^S(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{2} (G_{kl,pj} + G_{jl,pk}) \\ &= \frac{15}{r^7} x_k x_l x_p x_j - \frac{1}{r^3} \delta_{pl} \delta_{jk} \\ &\quad - \frac{3}{r^5} (\delta_{jp} x_k x_l + \delta_{pl} x_k x_j + \delta_{kj} x_l x_p + \delta_{kp} x_j x_l) \end{aligned}$$

Debido a que la ecuación que debemos resolver para el dipolo de fuerzas es una ecuación autoconsistente aproximaremos el dipolo de fuerzas a orden 2. Utilizando la aproximación de Born, para las interacciones en un sistema diluido tenemos:

$$\begin{aligned}
 d_{kj}^{Sn1} &= \frac{20\pi\eta a^3}{3} \mathbf{E}_{kj}^{\infty S} \\
 d_{kj}^{Sn2} &= \frac{20\pi\eta a^3}{3} \left(\mathbf{E}_{kj}^{\infty S} + \frac{5a^3}{6} \sum_{m \neq n} \mathbf{G}_{jl,pk}^S(\vec{r}_n - \vec{r}_m) \mathbf{E}_{pl}^{\infty Sm} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_b \mathbf{G}_{jl,pk}^S(\vec{r}_n - \vec{r}_b) \sigma_0 \hat{n}_p^b \hat{n}_l^b \right)
 \end{aligned}$$

Para evolucionar la ecuación de Jeffery debemos conocer el tensor de gradiente de velocidades en la posición de la bacteria, éste lo calcularemos como el gradiente de la velocidad de la esfera debido a la presencia de una bacteria, es decir,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E} &= \left(\mathbf{E}^\infty + \frac{5a^3}{6} \sum_n \mathbf{G}_{jl,pk}(\vec{r}_n - \vec{r}_{n_b}) d_{pl}^n \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{n_b \neq m_b} \sigma_0 \mathbf{G}_{jl,pk}(\vec{r}_{m_b} - \vec{r}_{n_b}) \hat{n}_p^{m_b} \hat{n}_l^{m_b} \right)
 \end{aligned}$$

Por lo tanto, conociendo todas estas ecuaciones recién podemos calcular la velocidad de las bacterias y evolucionar el sistema.

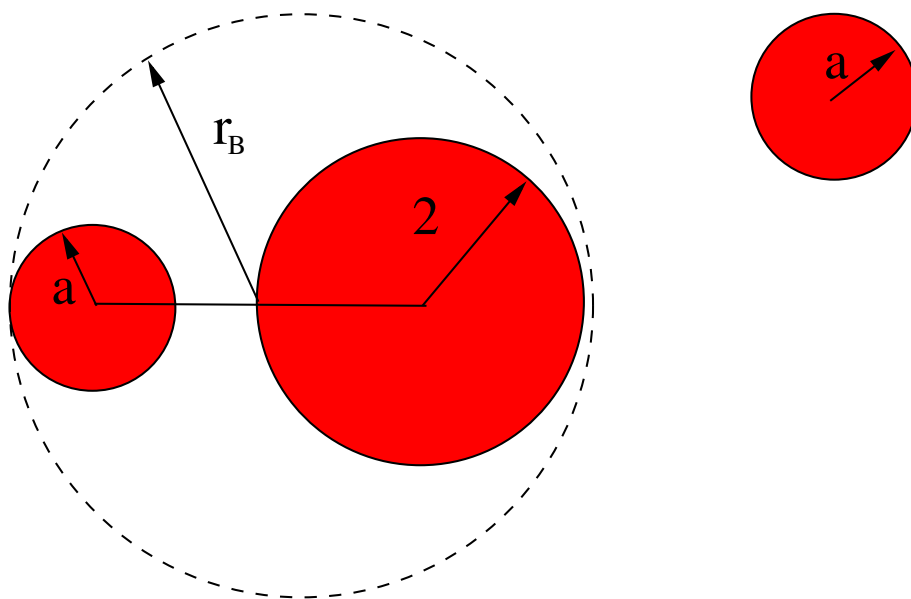


Figura 4.7: Una bacteria tipo cascabel con las dimensiones utilizadas en la simulación, en donde se muestra el radio efectivo $r_B = 3.5a$, que es utilizado al calcular la concentración de bacterias y para aplicar la fuerza repulsiva de corto alcance.

En resumen las ecuaciones a resolver son,

$$\mathbf{E} = \left(\mathbf{E}^\infty + \frac{5a^3}{6} \sum_n \mathbf{G}_{jl,pk}(\vec{r}_n - \vec{r}_{n_b}) d_{pl}^n \right. \quad (4.36)$$

$$\left. + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{n_b \neq m_b} \sigma_0 \mathbf{G}_{jl,pk}(\vec{r}_{m_b} - \vec{r}_{n_b}) \hat{n}_p^{m_b} \hat{n}_l^{m_b} \right) \quad (4.37)$$

$$d_{kj}^{Sn} = \frac{20\pi\eta a^3}{3} \left(\mathbf{E}_{kj}^{\infty S} + \frac{5a^3}{6} \sum_{m \neq n} \mathbf{G}_{jl,pk}^S(\vec{r}_n - \vec{r}_m) \mathbf{E}_{pl}^{\infty Sm} \right. \quad (4.38)$$

$$\left. + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_b \mathbf{G}_{jl,pk}^S(\vec{r}_n - \vec{r}_b) \sigma_0 \hat{n}_p^b \hat{n}_l^b \right) \quad (4.39)$$

$$u_i^{\text{bacteria}}(\vec{r}_{n_b}) = V_{0i} + V_{ti} + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_n^{NA} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r}_{n_b} - \vec{r}_n) d_{kj}^{Sm} \quad (4.40)$$

$$+ \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{n_b \neq m_b}^{NB} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r}_{n_b} - \vec{r}_{m_b}) \sigma_0 \hat{n}_k^{m_b} \hat{n}_j^{m_b} \quad (4.41)$$

$$u_i^{\text{esfera}}(\vec{r}_n) = u_i^\infty(\vec{r}_n) + \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{m \neq n}^{NA} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r}_m - \vec{r}_n) d_{kj}^{Sm} \quad (4.42)$$

$$+ \frac{1}{8\pi\eta} \sum_b^{NB} \mathbf{G}_{ij,k}(\vec{r}_n - \vec{r}_b) \sigma_0 \hat{n}_k^b \hat{n}_j^b \quad (4.43)$$

4.9. Simulación y Resultados

Los métodos numéricos utilizados en estas simulaciones son los mismos utilizados en la sección 3.5, es decir debido a que la caja no está confinada son utilizadas las condiciones de borde de Less-Edwards cuando aplicamos un cizalle simple, mientras que en el caso en que no es aplicado un cizalle las condiciones de borde vuelven a ser las condiciones de borde periódicas ordinarias (ver sec. 3.5.1). El método de integración de las ecuaciones tanto para suspensiones con cizalle y sin cizalle, corresponde al método Adams-Bashforth-Moulton (ABM) a tercer orden (ver sec. 3.5.2).

4.9.1. Suspensión sin cizalle

En esta sección estudiaremos el caso de una suspensión mixta de esferas de radio a y bacterias de radio para la cabeza $R_H = 2a$, para la cola $R_T = a$ y largo $d = 4a$, con $a = 1[\mu\text{m}]$. Inicialmente las partículas y las bacterias se encuentran ubicadas

de manera aleatoria en una caja cúbica de volumen L^3 y además las bacterias se encuentran orientadas al azar en cualquier dirección. La suspensión no se encuentra expuesta a un flujo externo por lo que la difusión sólo depende del movimiento de las bacterias en el fluido. Las bacterias se mueven con velocidad $V_0 = 20[\mu\text{m}/\text{s}]$, el parámetro geométrico de las bacterias para estos valores de R_H y R_T en (4.34) es $\beta = -0.735$ y el valor para el dipolo de fuerzas permanente en (4.35) es $\sigma_0 = 21.5$, el cual es calculado a partir de una fuerza medida experimentalmente [63] $F = 0.42[\text{pN}]$, mientras que en nuestro caso la fuerza es $F_0 = V_0\eta a = 0.2[\text{pN}]$. La escala de longitud característica la fijaremos con $a = 1[\mu\text{m}] = 1$ y la escala temporal $\tau = a/V_0 = 1/20[\text{s}] = 1$ la masa está fijada por la viscosidad dinámica $\eta = 10^{-3}[\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}] = 1$. Estudiaremos dos casos, el primero es en el que se mantiene fijo el número de bacterias $N_B = 400$ y se varía el número de esferas desde $N_A = 100 - 400$ y el segundo caso es en el que se mantiene fijo el número de esferas $N_A = 400$ y se varía el número de bacterias $N_B = 100 - 400$. La caja es cúbica con valores de $L = 300a$, por lo que las concentraciones las podemos estimar como $\phi_B = 4\pi N_B r_B^3 / (3L^3)$, con $r_B = 3.5a$ y la concentración de esferas como $\phi_A = 4\pi N_A a^3 / 3L^3$.

Difusión de esferas

Las esferas difunden rápidamente después de pasar por un régimen subdifusivo corto. El régimen difusivo se alcanza al mismo tiempo tanto en el eje y como en el z , debido a que no estamos en presencia de ningún flujo externo expuesto (ver figura 4.8). Sorprende que sólo la presencia de bacterias permita que se alcance un régimen difusivo más rápido que en el caso de la auto-difusión inducida por el cizalle visto en el capítulo anterior .

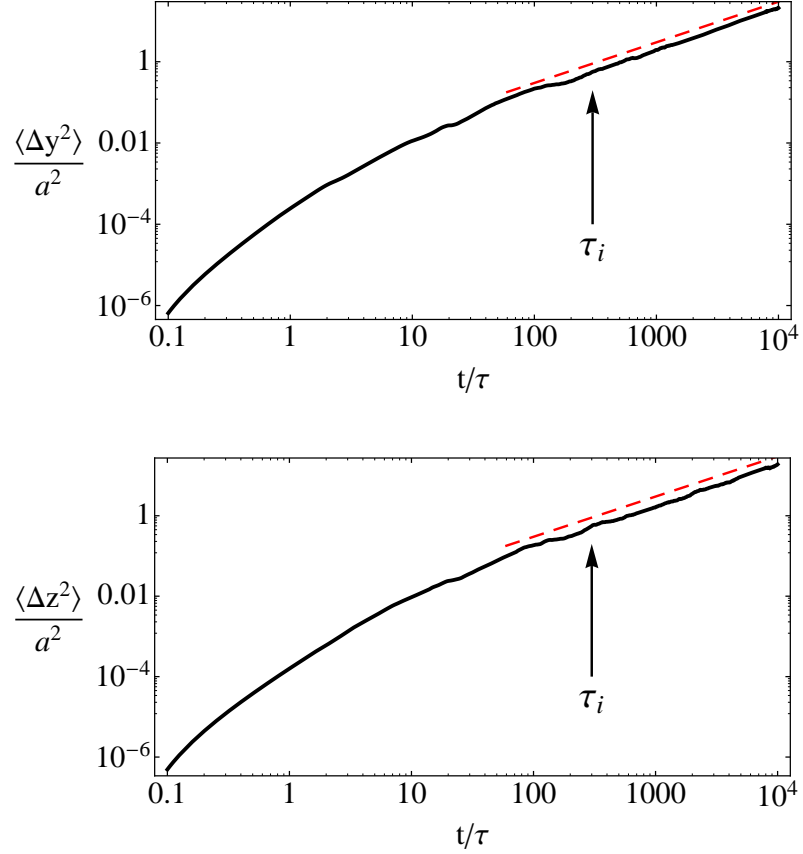


Figura 4.8: Desplazamientos cuadráticos medios en escala logarítmica para $N_A = 400$ esferas, mientras se varían las bacterias, en este caso $N_B = 100$. Arriba se presenta el desplazamiento cuadrático medio en el eje y y abajo en el eje z . En la figura la línea roja segmentada representa una ajuste lineal de la forma $\frac{\langle \Delta(y,z)^2 \rangle}{a^2} \propto (t/\tau)$.

Al variar la concentración de esferas la difusividad de las esferas tanto en el eje y como en el z presenta una variación compleja, en el que inicialmente la difusión aumenta al aumentar la concentración de esferas ϕ_A , hasta alcanzar el que llamaremos concentración límite de esferas $\phi_A^{limite} \sim 4.5 \times 10^{-5}$, desde donde la difusividad comienza a disminuir a medida que ϕ_A sigue aumentando. Esto se debe a que la presencia de un número fijo de bacterias $N_B = 400$ que producen perturbaciones en el fluido permitiendo que las esferas migren entre las líneas de flujo. Pero hasta cierto punto o máxima concentración de esferas (ϕ_A^{limite}) ya que desde ahí en adelante la concentración de esferas es tan grande que la actividad de las bacterias no

es suficiente para lograr que todas las esferas en promedio realicen un movimiento aleatorio en todo el volumen (ver primera figura en 4.9).

En cambio al aumentar la concentración de bacterias ϕ_B y manteniendo fijo el número de esferas $N_A = 400$, la difusión de las esferas disminuye linealmente con la concentración de bacterias (figura inferior en 4.9).

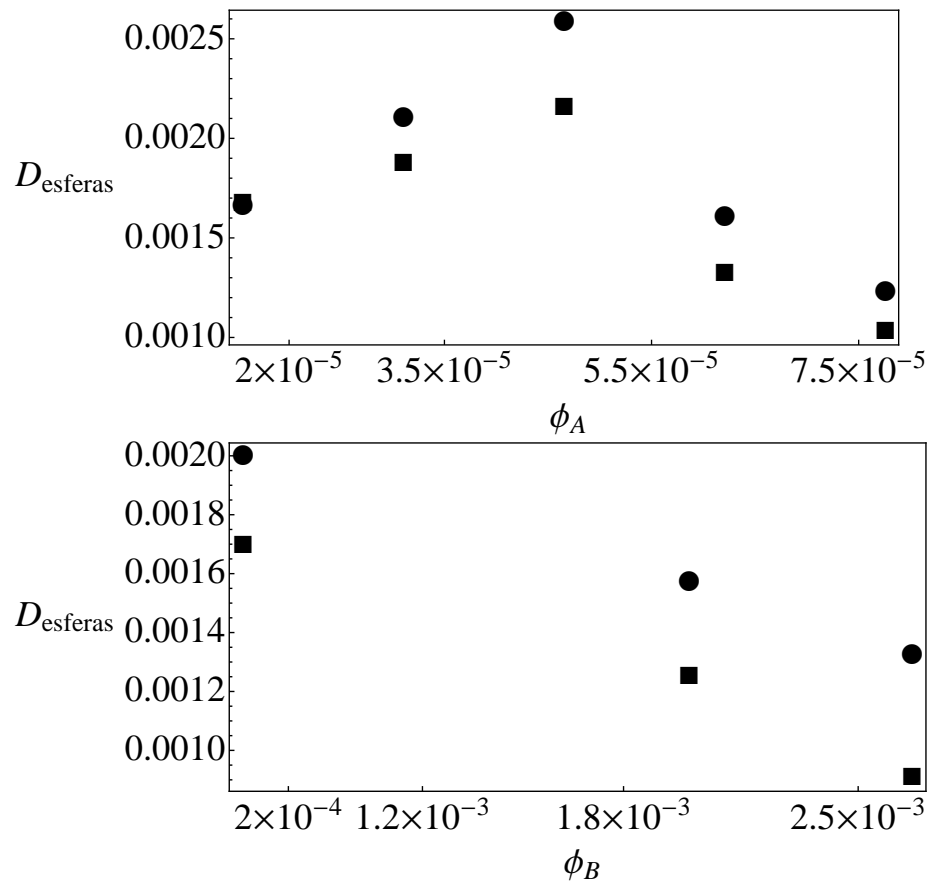


Figura 4.9: Coeficientes de difusión de las esferas, en círculo en el eje y y en cuadrados en el eje z . Arriba: se presenta la variación del coeficiente de difusión en el caso en que se varía la concentración de esferas ϕ_A y se mantiene fija la concentración de bacterias $\phi_B = 0.0026$. Abajo: se presenta la variación del coeficiente de difusión en el caso en que se mantiene fijo la concentración de esferas $\phi_A = 0.000062$ y se varía la concentración de bacterias ϕ_B .

Difusión de bacterias

Ahora estudiaremos los desplazamientos cuadráticos medios de las bacterias en ausencia de un flujo expuesto. En este caso variamos la concentración de bacterias pero mantenemos fijo el número de esferas $N_A = 400$. Las bacterias tanto en el eje y como en el z muestran un régimen difusivo (ver figura 4.10).

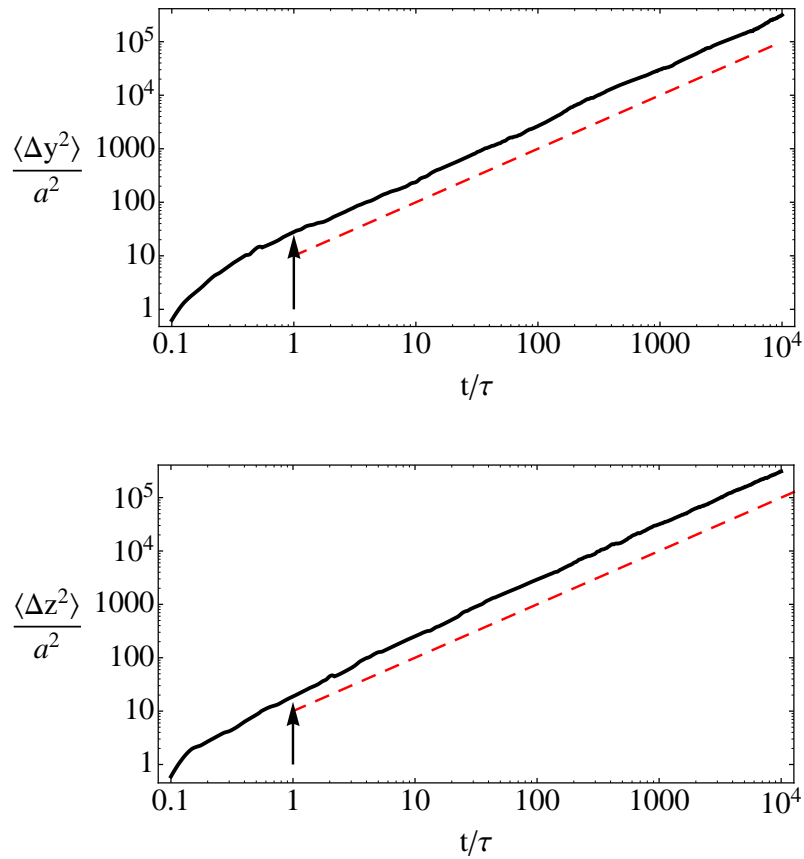


Figura 4.10: Desplazamientos cuadráticos medios para las bacterias. En este caso $N_B = 100$. Arriba se presenta el desplazamiento cuadrático medio en el eje y y abajo en el eje z . En la figura la línea roja segmentada representa una ajuste lineal de la forma $\frac{\langle \Delta(y,z)^2 \rangle}{a^2} \propto (t/\tau)$.

Realizando ajustes lineales a las curvas presentadas en la figura (4.10), encontramos que la difusividad de las bacterias en el caso en que se varía la concentración de esferas en la suspensión, tanto en el eje y como en el z , muestra un comportamiento

complejo (ver figura 4.11). Ya que el coeficiente de difusión de las bacterias disminuye a medida que aumenta ϕ_A , pero para valores mayores a ϕ_A^{limite} la difusión comienza a aumentar. En el caso en que ϕ_A esta fijo y variamos ϕ_B , en el eje y encontramos una variación lineal del coeficiente de difusión de las bacterias con la concentración de bacterias en la suspensión. Notemos que en este caso la dirección y es equivalente a la dirección z , por lo que la diferencia en la difusividad en la figura 4.11 es sólo numérica.

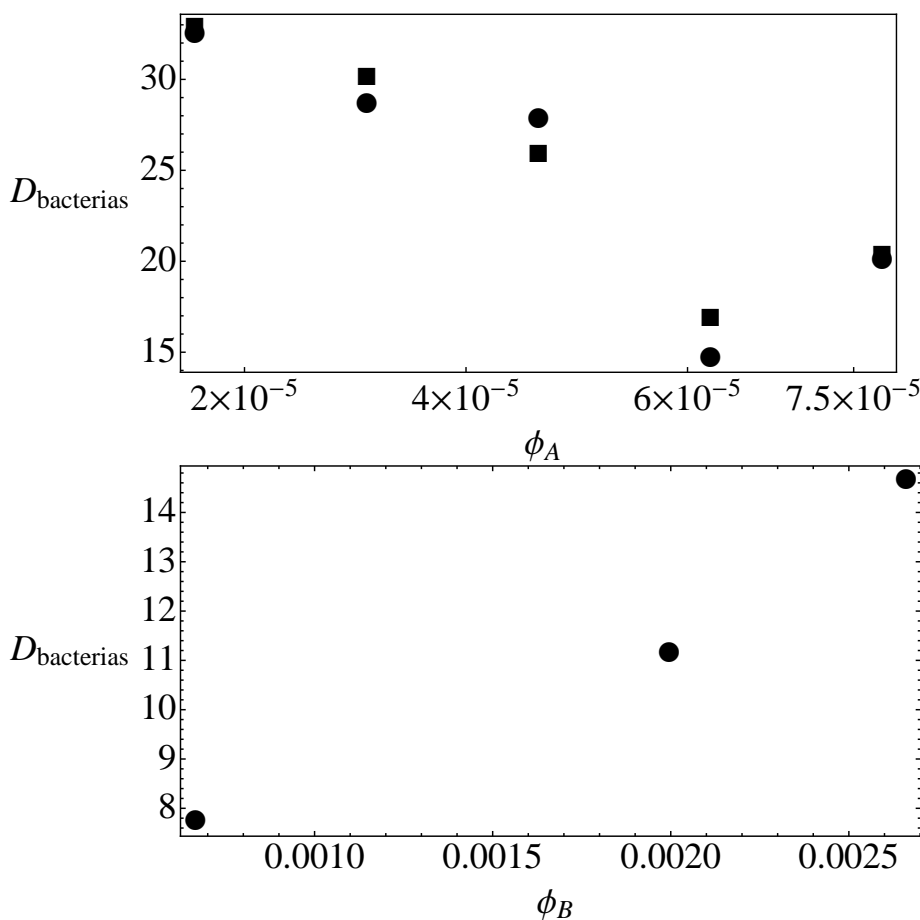


Figura 4.11: Coeficientes de difusión de las bacterias, en círculos en el eje y y en cuadrados en el eje z . Arriba: se presenta la variación del coeficiente de difusión en el caso en que se varía la concentración de esferas ϕ_A y se mantiene fija la concentración de bacterias $\phi_B = 0.0026$. Abajo: se presenta la variación del coeficiente de difusión en el caso en que se mantiene fijo la concentración de esferas $\phi_A = 0.000062$ y se varía la concentración de bacterias ϕ_B .

4.9.2. Suspensión con cizalle

En esta sección estudiaremos el caso de una suspensión mixta de esferas de radio a y bacterias de radio para la cabeza $R_H = 2a$, para la cola $R_T = a$ y largo $d = 4a$. Inicialmente las partículas y las bacterias se encuentran ubicadas de manera aleatoria en una caja cúbica de volumen L^3 y además las bacterias se encuentran orientadas al azar en cualquier dirección. La suspensión se encuentra expuesta a un cizalle simple en el eje x , de la forma $\vec{v}^\infty = y\dot{\gamma}\hat{x}$. Las direcciones del flujo ya fueron discutidas en el capítulo 3. En este caso la dinámica de las bacterias y las esferas es más complicada ya que en este caso las bacterias tienen una rotación debido al gradiente en el campo de velocidades lo que produce rotaciones en los nadadores (ver ec.4.30), al problema le agregamos una nueva escala de tiempo natural $\dot{\gamma}^{-1}$ y tanto las bacterias como las esferas experimentan una superposición de los efectos hidrodinámicos debido a la presencia de bacterias, esferas y un flujo externo. Las bacterias se mueven con velocidad $V_0 = 20[\mu\text{m/s}]$, el parámetro geométrico de las bacterias para estos valores de R_H y R_T en (4.34) es $\beta = -0.735$ y el valor para el dipolo de fuerzas permanente en (4.35) es $\sigma_0 = 21.5$, el cual es calculado a partir de una fuerza medida experimentalmente [63] $F = 0.42[\text{pN}]$, mientras que en nuestro caso la fuerza es $F_0 = V_0\eta a = 0.2[\text{pN}]$. La escala de longitud característica la fijaremos con $a = 1[\mu\text{m}] = 1$ y la escala temporal $\tau = a/V_0 = 1/20[\text{s}] = 1$ la masa está fijada por la viscosidad dinámica $\eta = 10^{-3}[\text{kg/m}\cdot\text{s}] = 1$ y la tasa de corte es $\dot{\gamma} = 1$.

Estudiaremos dos casos, el primero es en el que se mantiene fijo el número de bacterias $N_B = 400$ y se varía el número de esferas desde $N_A = 100 - 400$ y el segundo caso es en el que se mantiene fijo el número de esferas $N_A = 400$ y se varía el número de bacterias $N_B = 100 - 400$. La caja es cúbica con valores de $L = 300a$, por lo que las concentraciones las podemos estimar como $\phi_B = 4\pi N_B r_B^3 / (3L^3)$, con $r_B = 3.5a$ y la concentración de esferas como $\phi_A = 4\pi N_A a^3 / 3L^3$.

Difusión de esferas

En este caso las simulaciones realizadas fueron demasiado cortas para alcanzar el régimen difusivo final del sistema (ver figura 4.12 y 4.13), pero podemos observar que los desplazamientos cuadráticos medios tanto en la dirección del gradiente de velocidades y como en la dirección de vorticidad z son completamente distintos a los desplazamientos cuadráticos medios para el caso de una suspensión pasiva de esferas (ver figura 3.3 y 3.4).

En el caso en que se mantiene fijo el número de bacterias y variamos el número de esferas, tanto en la dirección y como en la z , se presenta un pequeño régimen subdi-

fusivo inicial seguido por uno difusivo con una duración de 5 décadas de unidades de tiempo aproximadamente, el que más tarde se vuelve superdifusivo variando proporcional a $\sim (t/\tau)^{1.6}$ en la dirección y y $\sim (t/\tau)^{1.5}$ en la dirección z . Estos exponentes son exactamente los predichos en el trabajo de Wu [35]. El coeficiente de difusión en ambas direcciones decrece al aumentar la concentración de esferas de una forma aproximadamente inversa $\sim \phi_A^{-1}$.

En el caso en que se mantiene fijo el número de esferas y se varía el número de bacterias, se observa en el desplazamiento cuadrático medio nuevamente un régimen superdifusivo con exponente $\sim (t/\tau)^{1.5}$ tanto en la dirección y como en la z . Debido a que la concentración de esferas está fija, el primer régimen difusivo aparece sólo cuando el número de bacterias es lo suficientemente grande en la dirección y y es más o menos constante en la dirección z , se observa además que el régimen subdifusivo inicial es más largo en la dirección y .

Podríamos decir que el régimen subdifusivo y el primer régimen difusivo en la dirección del gradiente de velocidades es difícil de determinar si se debe a la actividad de las bacterias o a un efecto puramente hidrodinámico, es claro que el régimen superdifusivo se puede relacionar con la actividad de las bacterias que inducen esta dinámica en las esferas pasivas.

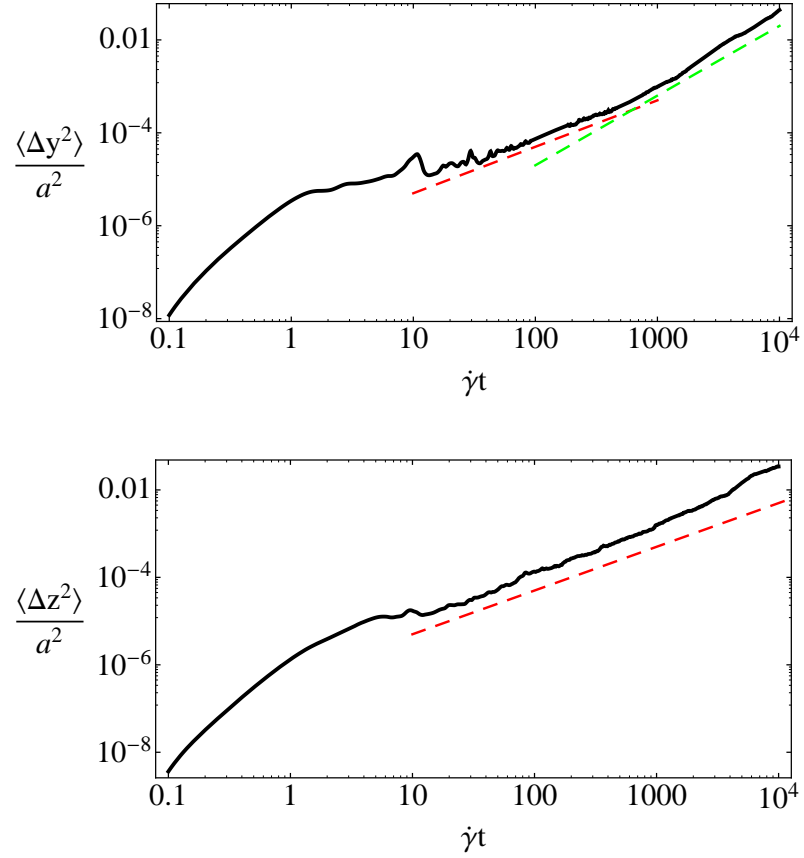


Figura 4.12: Desplazamientos cuadráticos medios de las esferas para $N_A = 400$ esferas, mientras se varían las bacterias, en este caso $N_B = 100$. Arriba se presenta el desplazamiento cuadrático medio en el eje y y abajo en el eje z . En la figura la línea roja segmentada representa un ajuste lineal de la forma $\frac{\langle \Delta(y,z)^2 \rangle}{a^2} \propto (t/\tau)$ y la línea verde segmentada representa un ajuste de la forma $\frac{\langle \Delta(y,z)^2 \rangle}{a^2} \propto (t/\tau)^{1.5}$.

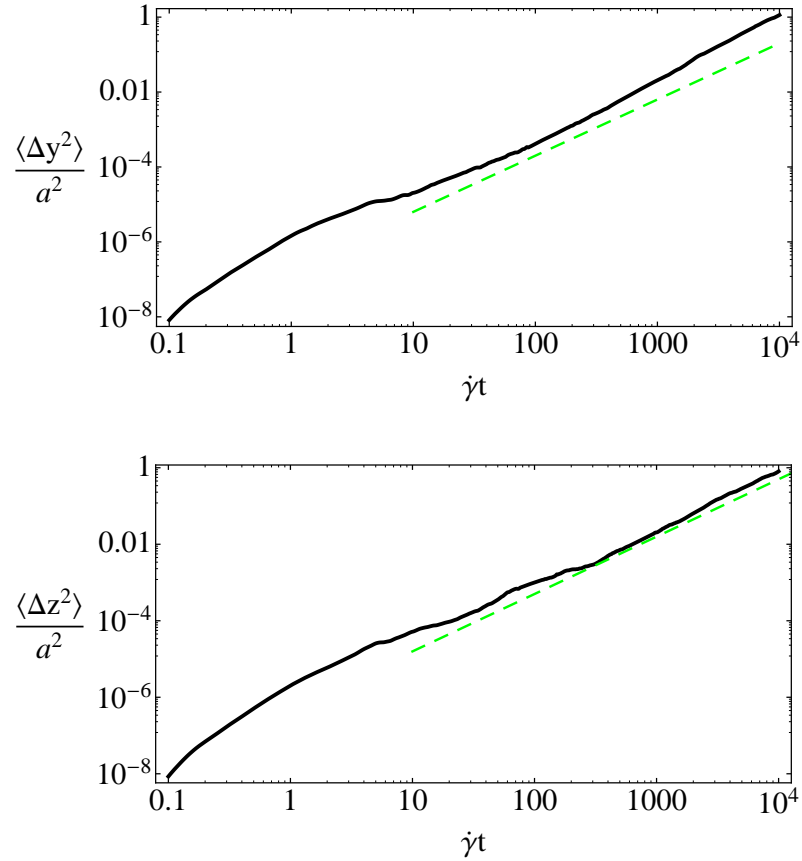


Figura 4.13: Desplazamientos cuadráticos medios de las bacterias para $N_B = 400$ bacterias y $N_A = 100$ esferas. Arriba se presenta el desplazamiento cuadrático medio en el eje y y abajo en el eje z . En la figura la línea verde segmentada representa un ajuste de la forma $\frac{\langle \Delta(y,z)^2 \rangle}{a^2} \propto (t/\tau)^{1.5}$.

Difusión de bacterias

Los desplazamientos cuadráticos medios para las bacterias muestran que las bacterias tanto en la dirección y como en la dirección z muestran un comportamiento difusivo a cortos tiempos el que persiste a lo largo de toda la simulación tanto al variar el número de bacterias como el número de esferas (ver figura 4.14).

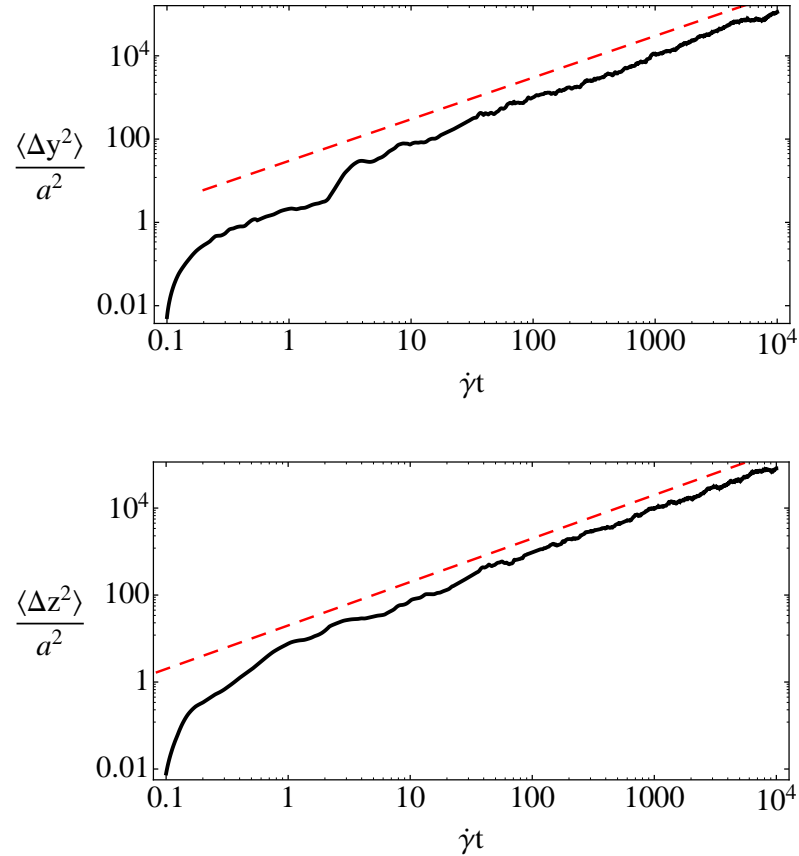


Figura 4.14: Desplazamientos cuadráticos medios para las bacterias. Para $N_A = 400$ esferas en este caso $N_B = 100$. Arriba se presenta el desplazamiento cuadrático medio en el eje y y abajo en el eje z . En la figura la línea roja segmentada representa una ajuste lineal de la forma $\frac{\langle \Delta(y,z)^2 \rangle}{a^2} \propto (t/\tau)$.

Como podemos observar, la presencia de un cizalle simple basta para que la difusividad de las bacterias aumente, sea más rápida y persista en ambos casos estudiados, es decir, al variar la concentración de esferas y de bacterias. Más aún, los coeficientes de difusión en ambas direcciones y para ambos casos aumentan siempre a medida que aumenta la concentración de esferas y de bacterias (ver figura 4.15). Esto se debe a que al agregar un flujo externo, la mera presencia de esferas pasivas o activas siempre equivale a agregar actividad al sistema. Ya que debido al cizalle impuesto las interacciones hidrodinámicas son más recurrentes y tienden a aumentar la migración de las esferas y las bacterias a través de todo el volumen.

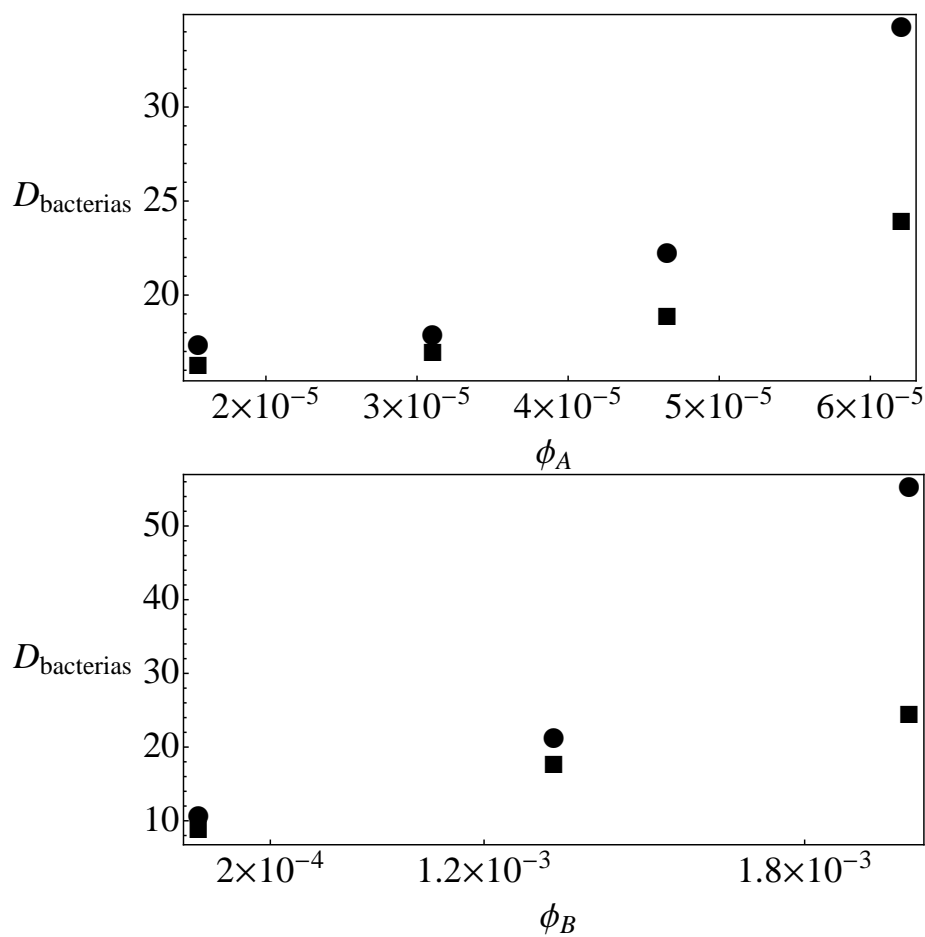


Figura 4.15: Coeficientes de difusión de las bacterias , en círculos el eje y y en cuadrados en el eje z . Arriba: se presenta la variación del coeficiente de difusión en el caso en que se varía la concentración de esferas ϕ_A y se mantiene fija la concentración de bacterias $\phi_B = 0.0026$. Abajo: se presenta la variación del coeficiente de difusión en el caso en que se mantiene fijo la concentración de esferas $\phi_A = 0.000062$ y se varía la concentración de bacterias ϕ_B .

4.10. Conclusiones

En este capítulo estudiamos suspensiones mixtas de esferas y bacterias interactuando a través de un fluido, el que en un caso tenía un cizalle simple impuesto en la dirección \hat{x} y en otro no había flujo externo. Encontramos que las interacciones de a pares entre esferas y bacterias son reversibles en el régimen de Stokes como era de esperar y que estas interacciones hidrodinámicas entre esferas y bacterias son suficientes para producir regímenes difusivos en las esferas y en las bacterias. Estos regímenes no sólo se alcanzaban más rápido que en el caso de la auto-difusión inducida por el cizalle, lo que nos muestra que la simple actividad de las bacterias es suficiente para obtener difusividad en suspensiones pasivas. También encontramos que el comportamiento de las bacterias siempre es difusivo, independiente de la dirección en la que se mida pero su variación con la concentración de esferas o de bacterias en la suspensión no es trivial. Por otro lado, encontramos que imponer un flujo externo en estas suspensiones mixtas agrega más actividad al sistema, produciendo difusividad mayor en el caso de las bacterias y coeficientes de difusión que aumentan siempre independiente de la dirección en que se mida y si se varía la concentración de esferas o bacterias. Lo que nos lleva a concluir que en el caso de un cizalle impuesto, la presencia tanto de esferas como bacterias siempre aumenta la difusividad. Para las esferas el caso de agregar un flujo externo, permite que las esferas logren regímenes superdifusivos a tiempos cortos y regímenes difusivos a tiempos más largos.

Capítulo 5

Bacteria nadando en un medio fluctuante.

5.1. Resumen

Como ya discutimos en la sección anterior, microorganismos autopropulsados como algas unicelulares o las bacterias nadan a lo largo de su vector director relativas al fluido que las rodea. En este capítulo se verá que, bajo un cizalle simple estacionario el vector director rota en órbitas cerradas (periódicas), cuya estructura periódica es preservada bajo cizalles oscilatorios. Si el cizalle es sujeto a pequeñas fluctuaciones producidas por irregularidades en el microcanal o por efecto de otros nadadores cercanos, el vector director se vuelve estocástico. La integración numérica del movimiento del nadador muestra que hay resonancia estocástica: el desplazamiento en la dirección de vorticidad es maximizado para una intensidad del ruido finita. Esta resonancia en el desplazamiento transversal es proporcional a la frecuencia de oscilación e independiente de la tasa de corte. El aumento en el desplazamiento puede tener efectos en la difusión transversal del nadador y en la reología de la suspensión. Los resultados presentados en este capítulo fueron publicados por Francisca Guzmán-Lastra y Rodrigo Soto, *Phys. Rev. E* **86**, 037301(2012) [27].

5.2. Introducción

Para estudiar la dinámica de las bacterias, durante los experimentos, éstas son ubicadas en aparatos microfluídicos que permiten la observación de su movimiento. Las paredes que confinan estos aparatos microfluídicos producen una rica dinámica en los nadadores. Es sabido que las bacterias, como la *E. coli* tiende a acercarse

a las superficies sólidas y nadar cerca de éstas por largos periodos de tiempo [47, 48]. Cuando éstas se mueven cerca de las superficies, su movimiento es típicamente circular con un radio de algunas decenas de micrones [48, 50, 51].

Las bacterias cuando son sometidas a flujos externos, presentan en muchos casos nados u orientaciones colectivas en alguna dirección. Si las bacterias se encuentran bajo la acción de un cizalle simple, éstas se orientan preferentemente a lo largo de la dirección extensional del flujo (ver Fig.(5.1)).

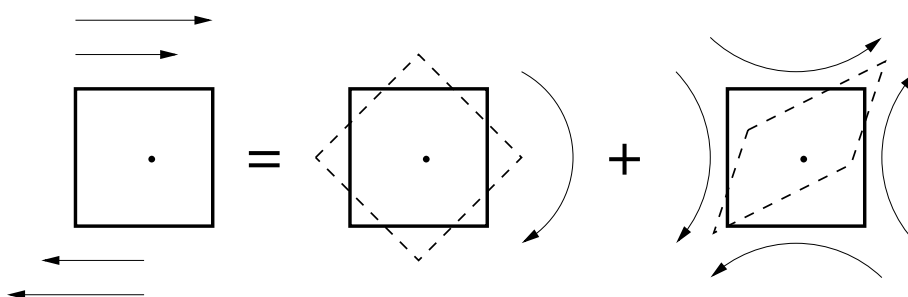


Figura 5.1: Movimiento local alrededor de un punto: Descomposición de un cizalle simple en un flujo rotante mas un flujo extensional.

Si bien la presencia de un flujo externo permite una rica dinámica en las bacterias, también lo es la presencia de otras bacterias nadando cerca unas de otras como ocurre en suspensiones densas. En estos casos las fluctuaciones en el fluido producidas por el nado de una bacteria cercana puede ser entendido como ruido auto-inducido por ellas mismas [34].

En este capítulo estudiamos el efecto del ruido (ya sea el auto inducido o uno proveniente de otras fuentes) en la dinámica del nadador bajo un cizalle simple oscilatorio. Será demostrado que el ruido entra como ruido multiplicativo en las ecuaciones de movimiento del nadador que ya son por si solas no lineales. Un fenómeno interesante llamado resonancia estocástica (SR), en el cual una función respuesta es maximizada para una intensidad de ruido finita, puede aparecer cuando un sistema es forzado periódicamente. En un principio pareció ser que la biestabilidad, forzamiento periódico y las fuerzas aleatorias eran necesarias para la aparición de la SR [41]. Pero después se volvió claro que SR puede aparecer en una larga variedad de sistemas, incluyendo sistemas lineales sujetos a ruido multiplicativo [42, 43]. En las siguientes secciones presentaremos SR para un nadador sometido a un cizalle simple oscilante bajo ruido: Para este flujo oscilatorio, el desplazamiento en la dirección de vorticidad es maximizado para una intensidad de ruido dada.

5.3. Dinámica determinista del nadador.

Considere un nadador autopropulsado moviéndose en un fluido a bajo número de Reynolds. El nadador se propulsa respecto al fluido con velocidad V_0 en la dirección del vector director \hat{n} . Si el cuerpo del nadador es mucho más pequeño que la distancia típica a la que la velocidad del fluido cambia, la corrección de Faxén puede ser despreciada y la velocidad total del nadador es $\vec{V} = V_0\hat{n} + \vec{v}$, donde \vec{v} es la velocidad del fluido en el centro del nadador [44, 45]. Los gradientes de velocidades inducen rotaciones en el nadador, descritas por la ecuación de Jeffery (5.1), por lo que el vector director \hat{n} evoluciona de acuerdo a esa ecuación.

$$\dot{\hat{n}} = (\mathbf{I} - \hat{n}\hat{n})[\beta\mathbf{E}^S + \mathbf{E}^{AS}]\hat{n}. \quad (5.1)$$

Bajo condiciones experimentales, es posible poner a la bacteria en una geometría del tipo Hele-Shaw e imponer un flujo oscilatorio. El flujo de Poiseuille que se forma en esta geometría tiene tasa de corte no uniforme y, como consecuencia de la ec. (5.1), la dinámica de la orientación de la bacteria (*pusher*) depende de la posición vertical en la celda. El hecho de que las bacterias se acerquen a las superficies simplifica el análisis. Cerca de las superficies la tasa de corte es aproximadamente constante y la misma tanto en la superficie de arriba como en la superficie de abajo. Por lo tanto la gran mayoría de las bacterias nadan en el flujo con la misma tasa de corte. Así, para separar los efectos de las paredes de los efectos del flujo oscilatorio, vamos a considerar un cizalle simple a través del fluido. Aunque las ecuaciones de movimiento no distinguen entre nadadores del tipo pusher o puller, la discusión previa sugiere que la aproximación a un cizalle simple es más relevante para nadadores del tipo pushers. Finalmente, para simplificar el análisis vamos a despreciar el movimiento circular cerca de la superficie.

El nadador es ubicado en un cizalle simple oscilatorio $\vec{v}^\infty = \dot{\gamma}^\infty \cos(\omega t) y\hat{x}$ (Figura 5.2). Las direcciones son tales que x es la dirección del flujo, y es la dirección gradiente y z es la dirección vorticidad.

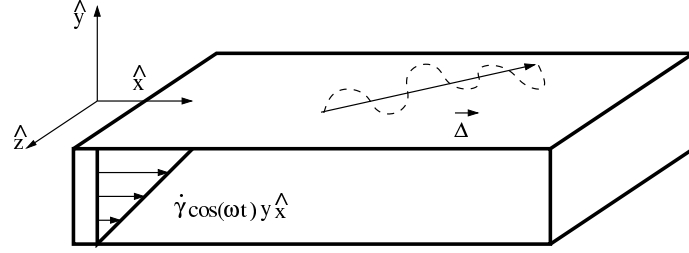


Figura 5.2: Esquema del modelo: El nadador se mueve en un fluido con un cizalle oscilatorio impuesto $\vec{v}^\infty = \dot{\gamma}^\infty \cos(\omega t) y \hat{x}$. La curva punteada muestra una posible trayectoria y el desplazamiento *coarse grained* $\vec{\Delta}$ es evaluado por un lapso de tiempo de varios periodos.

A continuación resolveremos la Ec.(5.1), para un nadador con parametro geométrico $\beta = 1$, sin ruido y sometido a un cizalle simple oscilante. Escribiendo el vector director en coordenadas esféricas, $(\cos \phi \sin \theta, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ con θ el ángulo polar y ϕ el ángulo azimutal.

$$\dot{\hat{n}} = \begin{pmatrix} -\sin \phi \sin \theta \dot{\phi} + \cos \phi \cos \theta \dot{\theta} \\ \cos \theta \sin \phi \dot{\theta} + \sin \theta \cos \phi \dot{\phi} \\ -\sin \theta \dot{\theta} \end{pmatrix}$$

Encontramos dos ecuaciones para los ángulos,

$$\dot{\theta} = \beta(\dot{\gamma}^\infty/\omega) \cos(s) \cos \theta \sin \theta \cos \phi \sin \phi \quad (5.2)$$

$$\dot{\phi} = \frac{\dot{\gamma}^\infty \cos(s)}{2\omega} (-1 + \beta \cos(2\phi)) \quad (5.3)$$

con $s = \omega t$. Integrando

$$\int_{\phi_0}^{\phi} \frac{d\phi'}{\cos(2\phi') - 1} = \frac{\dot{\gamma}^\infty}{2\omega} \int_0^s \cos s' ds' \quad (5.4)$$

$$\int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta'}{\sin(2\theta')} = \frac{\dot{\gamma}^\infty}{4\omega} \int_0^s \cos(s') \sin(2\phi(s')) ds' \quad (5.5)$$

Resolviendo,

$$\phi(s) = \cot^{-1} \left(\cot \phi_0 + \frac{\dot{\gamma}^\infty}{\omega} \sin s \right) \quad (5.6)$$

$$\theta(s) = \tan^{-1} \left(\tan \phi_0 \sqrt{\frac{2 + 2a^2 + b^2 - b^2 \cos(2s) + 4ab \sin(s)}{2((\cot \phi_0 + \dot{\gamma}^\infty/\omega)^2 + 1)}} \right)$$

En donde ϕ_0 y θ_0 dependen de la condición inicial para la orientación, $a = \cot(\phi_0)$ y $b = \dot{\gamma}^\infty$. En el caso en que $\beta \neq 1$ y tenemos un nadador sin ruido sometido a un cizalle simple oscilante, las ecuaciones de movimiento para el nadador son

$$\int_{\phi_0}^{\phi} \frac{d\phi'}{\beta \cos(2\phi') - 1} = \frac{\dot{\gamma}^\infty}{2\omega} \int_0^s \cos s' ds' \quad (5.7)$$

$$\int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta'}{\sin(2\theta')} = \frac{\beta \dot{\gamma}^\infty}{4\omega} \int_0^s \cos(s') \sin(2\phi(s')) ds' \quad (5.8)$$

Resolviendo,

$$\begin{aligned} \phi(s) &= \tan^{-1} \left[\sqrt{\frac{1-\beta}{\beta+1}} \tan \left(\Phi_0 - \frac{\dot{\gamma}^\infty}{2\omega} \sqrt{1-\beta^2} \sin(s) \right) \right] \\ \theta(s) &= \tan^{-1} \left[\frac{\tan \theta_0 \sqrt{1-\beta \cos(2 \tan^{-1}(\sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}} \tan \Phi_0))}}{\sqrt{1-\beta \cos(2 \tan^{-1}(\sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}} \tan(\Phi_0 - \frac{\dot{\gamma}^\infty \sqrt{1-\beta^2}}{2\omega} \sin(s))))}} \right] \end{aligned} \quad (5.9)$$

en donde $\Phi_0 = \tan^{-1}(\sqrt{(1+\beta)/(1-\beta)} \tan \phi_0)$. Las soluciones resumidas en las ecuaciones (5.7 y 5.9) son ecuaciones periódicas que describen la rotación para un nadador sometido a un cizalle simple oscilatorio para el caso de un nadador infinitamente elongado $\beta = 1$ y para el caso en que $\beta \neq 1$ respectivamente. Por lo tanto, cuando el flujo es oscilatorio las órbitas son siempre cerradas y se comportan cualitativamente similares para distintos valores de β como se muestra en la figura 5.3. En el caso de un flujo estacionario ($\omega = 0$), la evolución temporal del vector director depende fuertemente del valor del parámetro β . En la figura 5.3 se muestra la evolución del director en los casos en que $\beta = 0.6$ y $\beta = 1$. En el primer caso, las órbitas son cerradas con un periodo proporcional a $1/\dot{\gamma}^\infty$, mientras que en el segundo caso las órbitas son abiertas y el director se orienta en la dirección $\pm x$.

Basados en estos resultados, en lo que sigue vamos a analizar el caso en que $\beta = 1$ en la ec. (5.1) ya que queremos estudiar efectos de la oscilación del flujo y en ese caso el valor de β es irrelevante. El caso en que $\beta = 0.6$ también fue estudiado, sus resultados se presentan más adelante en la discusión.

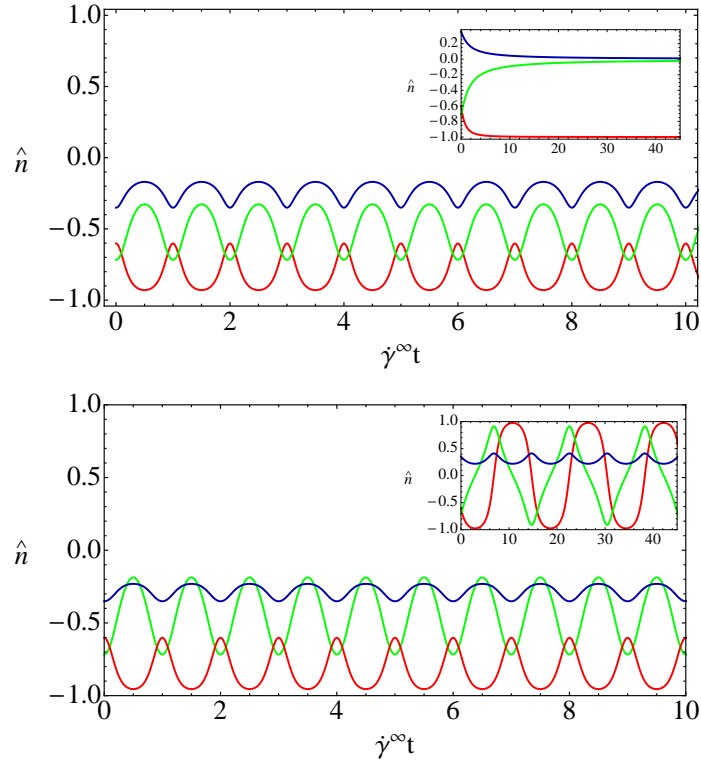


Figura 5.3: Evolución temporal de las componentes del vector director del nadador: n_x (línea roja), n_y (línea verde) y n_z (línea azul). Los parámetros geométricos del nadador son $\beta = 1$ (arriba) y $\beta = 0.6$ (abajo). Las figuras principales muestran el caso en que se impone un flujo oscilatorio con $\omega/\dot{\gamma}^\infty = 2\pi$ y los insertos el caso de un cizalle estacionario con $\omega = 0$. Las curvas dependen de las condiciones iniciales pero son cualitativamente similares para las otras condiciones iniciales.

5.4. Flujo oscilatorio ruidoso

Cuando un nadador microscópico es ubicado en un flujo externo, está sujeto a fluctuaciones de diferente origen. Primero, hay una fuerza térmica (Browniana) que produce reorientaciones al azar en las componentes térmicas de la velocidad. El efecto de estas fluctuaciones térmicas ha sido largamente estudiado y resulta en un movimiento difusivo térmico [29] y en la suavización de las órbitas de Jeffery [32, 33]. Otra fuente de ruido son las fluctuaciones en el campo de velocidades (y en el gradiente de velocidades) en el cual el nadador se mueve. Las fluctuaciones en la velocidad no produce grandes efectos, excepto en agregar un movimiento difusivo al nadador. De todas maneras, como será demostrado, las fluctuaciones en el gradiente

de velocidades lleva a desplazamientos preferenciales del nadador en la dirección de vorticidad, efecto que es magnificado para una intensidad de ruido dada. En experimentos, el ruido en el gradiente de velocidades puede tener distintas fuentes, aquí mencionaremos tres. Primero, el flujo oscilatorio impuesto se puede desviar de ser perfectamente sinusoidal de una manera desordenada. Segundo, el microcanal puede tener asperezas (sub) micrométricas induciendo fluctuaciones en la velocidad en el marco Lagrangiano del fluido. Finalmente, otros nadadores en la vecindad del objeto en estudio pueden crear corrientes que son super-impuestas al flujo oscilatorio. Las intensidades de estas fluctuaciones dependen de condiciones experimentales y de la concentración de bacterias. En presencia de ruido, el tensor de tasa de corte que aparece en la ecuación de Jeffery (5.1) es

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}^\infty(t) + \mathbf{E}^{\text{noise}}(t)$$

donde $\mathbf{E}^\infty(t) = \dot{\gamma}^\infty \cos(\omega t) \hat{x} \hat{y}$ corresponde al cizalle oscilatorio impuesto y $\mathbf{E}^{\text{noise}}(t)$ toma en cuenta las fluctuaciones en la velocidad. Es modelado como un tensor de ruido blanco con componentes de intensidad Γ , a las que se les sustrae la traza para modelar un fluido incompresible. Es decir, un tensor intermedio es construido con las componentes F_{ij} satisfaciendo

$$\langle F_{ij}(t) F_{kl}(t') \rangle = \Gamma \delta_{ik} \delta_{jl} \delta(t - t')$$

Luego, el tensor $\mathbf{E}^{\text{noise}}$ tiene componentes

$$E_{ik}^{\text{noise}} = F_{ik} - F_{jj} \delta_{ik} / 3$$

y las correlaciones resultantes son

$$\langle E_{ij}^{\text{noise}}(t) E_{kl}^{\text{noise}}(t') \rangle = \Gamma (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{ij} \delta_{kl} / 3) \delta(t - t')$$

En resumen, la posición \vec{r} y director \hat{n} evolucionan de acuerdo a las ecuaciones,

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = V_0 \hat{n} + \dot{\gamma}^\infty \cos(\omega t) y \hat{x}, \quad (5.10)$$

$$\frac{d\hat{n}}{dt} = (\mathbf{I} - \hat{n} \hat{n}) \left[\dot{\gamma}^\infty \cos(\omega t) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \mathbf{E}^{\text{noise}} \right] \hat{n}. \quad (5.11)$$

La intensidad del ruido Γ tiene unidades de la inversa del tiempo, por lo que debería ser comparado con $\dot{\gamma}^\infty$ o bien con ω para cuantificar si el ruido es grande o pequeño. Considerando la tasa de corte $\dot{\gamma}^\infty$, la frecuencia de oscilación ω y la intensidad del

ruido Γ , encontramos dos parámetros adimensionales que pueden ser variados. Escogemos fijar $\dot{\gamma}^\infty$ y variar Γ y ω . Utilizaremos cuatro frecuencias $\omega_1/\dot{\gamma}^\infty = \pi/15$, $\omega_2/\dot{\gamma}^\infty = \pi/10$, $\omega_3/\dot{\gamma}^\infty = \pi/5$, y $\omega_4/\dot{\gamma}^\infty = 2\pi/3$, mientras que variaremos Γ/ω en un amplio rango. Notemos que los valores explorados de $\omega/\dot{\gamma}$ son experimentalmente realizables. Por ejemplo, en un aparato microfluídico de sección transversal $L_z \times L_y = 300 \times 50 \mu\text{m}^2$, con un flujo $Q = 5\text{nl/s}$, las frecuencias estudiadas varían en el rango $\omega \sim 0.6 - 13 \text{ Hz}$. La ecuación resultante para el vector director del nadador es no lineal y el ruido es multiplicativo. Esto puede derivar en fenómenos complejos en contraste con los efectos producidos por el ruido aditivo que representa el ruido térmico [41]. El objetivo de este estudio es describir el efecto de variar la intensidad de este ruido.

5.5. Métodos numéricos

Resolver las ecuaciones para la evolución temporal del vector director \hat{n} con ruido multiplicativo Ec. (5.11) implica hacer uso de métodos más sofisticados que la integración de Euler, ya que el ruido afecta el paso de tiempo en la integración. El método que utilizamos es una integración del tipo predictor-corrector para ruido multiplicativo, llamado método de Heun. En la fase predictora tomamos la variable que conocemos en el instante t , llamémosla \vec{y}_t y la integramos de la siguiente manera

$$\vec{x}_t = \vec{y}_t + \vec{F}(\vec{y}_t)\Delta t + \vec{G}(\vec{y}_t) \cdot \mathbf{E}^{\text{noise}} \sqrt{\Delta t} \quad (5.12)$$

y en la fase correctora,

$$\vec{y}_{t+\Delta t} = \vec{x}_t + \frac{\Delta t}{2}(\vec{F}(\vec{y}_t) + \vec{F}(\vec{x}_t)) + \frac{\sqrt{\Delta t}}{2}(\vec{G}(\vec{y}_t) + \vec{G}(\vec{x}_t)) \cdot \mathbf{E}^{\text{noise}} \quad (5.13)$$

en donde Δt es el paso de tiempo, en nuestro caso lo elegimos como $\dot{\gamma}^\infty \Delta t = 0.01$ y $\vec{y}_t = \hat{n}_t$. Reescribiendo la Ec.(5.11), en este caso tenemos que las funciones \vec{F} y \vec{G} son:

$$\vec{F}(\hat{n}) = (\mathbf{I} - \hat{n}\hat{n})(\beta\mathbf{E}^S + \mathbf{E}^{AS})\hat{n} \quad (5.14)$$

$$\vec{G}(\hat{n}) = (\mathbf{I} - \hat{n}\hat{n})(\beta\mathbf{E}^{\text{noise}S} + \mathbf{E}^{\text{noise}AS})\hat{n} \quad (5.15)$$

Para integrar la posición de la bacteria utilizaremos la ecuación (5.11), la que resolveremos utilizando el mismo procedimiento descrito en la secciones (3.5.1,3.5.2).

5.6. Resultados

5.6.1. Vector director

La figura 5.4 muestra la evolución de las componentes del vector director para distintas intensidades en el ruido. Para pequeñas intensidades ((a) en la figura), las órbitas de Jeffery son levemente perturbadas y conservan su estructura periódica. Para tiempos mayores (que no se muestran en la figura) el vector director oscila alrededor de la misma dirección fijada por las condiciones iniciales. Para grandes intensidades de ruido ((d) en la figura), la estructura periódica se pierde completamente y el director realiza un movimiento aleatorio.

En el caso de una intensidad de ruido intermedio las órbitas preservan la periodicidad para tiempos cortos ((b) en la figura), pero esta se pierde después de algunos periodos. Después de largos tiempos ((c) en la figura) el nadador oscila por largos periodos en algunas orientaciones hasta que cambia a una nueva orientación. Las transiciones toman lugar en tiempos aleatorios y la nueva orientación también es aleatoria. Considerando la simetría polar, los promedios impares del vector director, velocidad y desplazamientos desaparecen cuando se promedia sobre el ruido en un periodo. Para cuantificar el grado de orientación, los promedios cuadráticos serán considerados. Los promedios cuadráticos del vector director $\langle n_x^2 \rangle$, $\langle n_y^2 \rangle$ y $\langle n_z^2 \rangle$, son calculados para grandes tiempos, después que los efectos de transiente de las condiciones iniciales han desaparecido (Fig. 5.5). El nadador se orienta preferentemente a lo largo del eje x excepto para intensidades de ruido muy grandes ($\Gamma/\dot{\gamma}^\infty \sim 1$) en los que se orienta isotrópicamente y $\langle n_x^2 \rangle = \langle n_y^2 \rangle = \langle n_z^2 \rangle = 1/3$. Note que en el caso de fibras pasivas elongadas, se ha encontrado que éstas se orientan preferentemente a lo largo del eje z [56] cuando están sometidas a un cizalle oscilatorio. De todas maneras, en ese caso, el alineamiento es producido por efecto de los volúmenes excluidos que no aparecen en nuestro problema debido a que estamos considerando un nadador aislado.

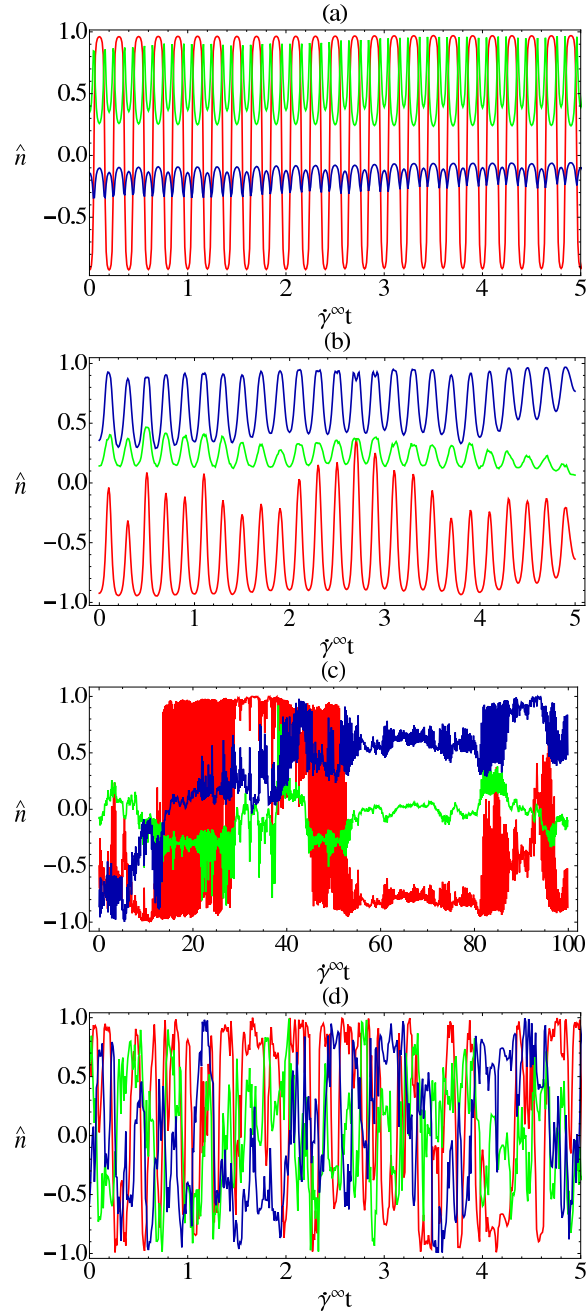


Figura 5.4: Evolución temporal de las componentes del vector director del nadador bajo un cizalle oscilatorio: n_x (línea roja), n_y (línea verde) y n_z (línea azul). Las intensidades del ruido son (a) $\Gamma/\dot{\gamma}^\infty = 0.001$, (b) $\Gamma/\dot{\gamma}^\infty = 0.01$ (intensidad de ruido resonante), (c) el mismo valor para Γ pero para tiempos más largos, y (d) $\Gamma/\dot{\gamma}^\infty = 0.316$. El parámetro geométrico del nadador es $\beta = 1$ y la frecuencia de oscilación del cizalle es ω_2 . Las curvas dependen de las condiciones iniciales pero son cualitativamente similares a las otras condiciones iniciales.

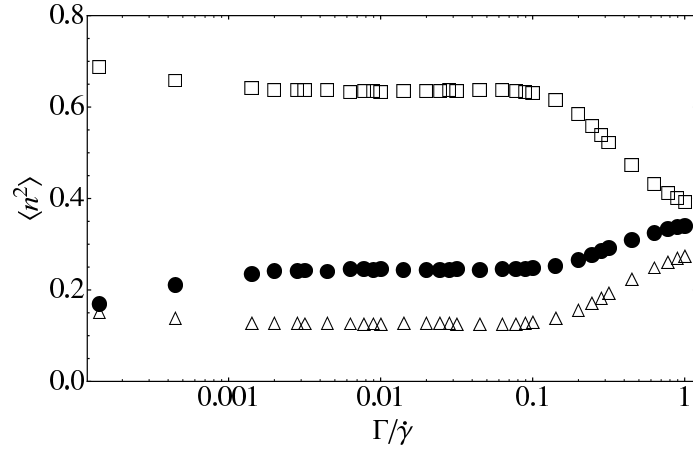


Figura 5.5: Promedios cuadráticos de las componentes del vector director $\langle n_x^2 \rangle$ (cuadrados), $\langle n_y^2 \rangle$ (triángulos) y $\langle n_z^2 \rangle$ (círculos sólidos) como una función de la intensidad del ruido Γ . La frecuencia de oscilación es ω_2 . Resultados similares son obtenidos para otras frecuencias.

5.6.2. Vector desplazamiento

Aunque el nadador se orienta principalmente en el eje x (direcciones positiva y negativa), el desplazamiento medio puede ser en una dirección distinta debido a que las oscilaciones pueden llevar a cancelaciones en la dirección x . Para sustraer el efecto de las oscilaciones rápidas, el vector desplazamiento $\vec{\Delta}$ es calculado por un lapso de 30 periodos, y más tarde dividido en 30. Este número de periodos es suficientemente grande para obtener una descripción *coarse grained* de los desplazamientos, promediando sobre los movimientos de ida y venida inducido por las órbitas de Jeffery y las oscilaciones del cizalle, pero lo suficientemente pequeñas para capturar el movimiento coherente mostrado en la figura 5.4 (c).

Serán calculados los promedios $\langle \Delta_y^2 \rangle$ y $\langle \Delta_z^2 \rangle$ del vector desplazamiento. El promedio $\langle \Delta_x^2 \rangle$ no está bien definido porque depende de la línea de corriente en la que el nadador está localizado. Los promedios cuadráticos medios son mostrados en la figura Fig. 5.6 como una función de la intensidad del ruido. El desplazamiento en la dirección de vorticidad— $\langle \Delta_z^2 \rangle$ —muestra un máximo para una intensidad de ruido pequeña pero finita. Los nadadores muestran un aumento en el movimiento transversal a pesar de que el vector director apunta en la dirección x (ver figura 5.5). La figura 5.6 muestra el desplazamiento resonante normalizado con la distancia avanzada en un periodo, para $\beta = 1$ (arriba) y $\beta = 0.6$ (abajo), éste presenta un leve aumento con la frecuencia de oscilación como se muestra en la figura 5.7. Los desplazamientos

cuadráticos en la dirección y son más pequeños que los ocurridos en la dirección z y no muestran un máximo.

El fenómeno observado corresponde a la llamada resonancia estocástica en el cual la respuesta (desplazamiento transversal) es maximizada para una intensidad de ruido finita [41–43, 57]. Para ruidos más pequeños que el ruido resonante, las órbitas de Jeffery son debilmente perturbadas y para ruidos más grandes que el ruido resonante se produce una respuesta completamente isotrópica. En la intensidad de ruido resonante la trayectoria tiene la apariencia mostrada en la Fig.5.4(c). Debe ser mencionado que la intensidad de ruido resonante es pequeña, $\Gamma^{\text{res}} \ll \dot{\gamma}^\infty, \omega$. Esto es responsable de las grandes tiempos de transición temporal observadas en la Fig.5.4(c) y 5.4 (d). Las curvas de resonancia para diferentes frecuencias colapsan cuando son graficadas contra Γ/ω y reescaladas a su valor máximo ver figura superior en (Fig.5.6), debido a este colapso en las curvas es que podemos obtener que la intensidad de ruido resonante Γ^{res} es proporcional a la frecuencia de oscilación del flujo ω . La resonancia observada es ancha y plana, haciendo difícil indentificar la intensidad de ruido resonante Γ^{res} con precisión. Su valor esta en el rango $\Gamma^{\text{res}} = (8-30) \times 10^{-2}\omega$. La resonancia estocástica ha sido observada en sistemas lineales (i.e., sin biestabilidad), sujetas a ruido multiplicativo siempre que el ruido tenga alguna correlación temporal finita [42, 43]. En el presente caso, la correlación en el ruido es cero pero dos aspectos podrían llevar a superar esta limitación. Primero, las ecuaciones son no-lineales y ningún análisis simple excluye SR en este caso. Segundo, hay un sistema de ecuaciones acopladas y es sabido que en este caso una correlación finita temporal se puede desarrollar como en el caso del modelamiento del ruido Ornstein-Uhlenbeck con una ec. de Langevin [58].

Para el caso de un nadador elongado que no es infinitamente delgado, $\beta = 0.6$ es posible, también, observar el fenómeno de la resonancia estocástica. En la figura inferior en Fig. 5.6 se muestran los promedios de los desplazamientos coarse grained al cuadrado en función de distintas intensidades para el ruido, en la dirección y y en la dirección z . La intensidad del ruido resonante es más pequeña que en el caso en que $\beta = 1$ y es aproximadamente $\Gamma/\dot{\gamma}^\infty \sim 0.001$ para $\omega_3/\dot{\gamma}^\infty = \pi/5$. El desplazamiento transversal resonante para $\beta = 0.6$ es menor que en el caso en que $\beta = 1$ para la misma frecuencia. En la figura (5.6.1) podemos observar que el desplazamiento transversal resonante también aumenta con la frecuencia de oscilación para el caso en que $\beta = 1$.

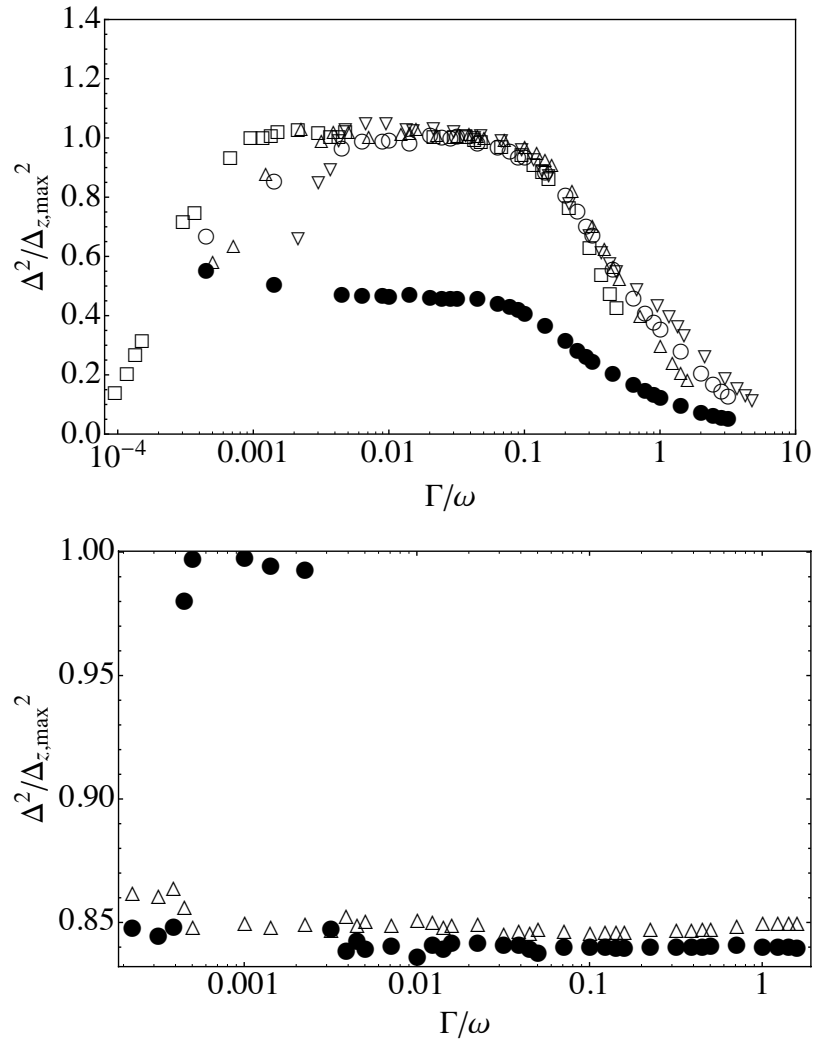


Figura 5.6: Desplazamiento coarse grained al cuadrado como función de la intensidad del ruido Γ para un nadador caracterizado por un parámetro geométrico $\beta = 1$ (arriba) y $\beta = 0.6$ (abajo). La escala lineal vertical ha sido reescalada para cada frecuencia con el máximo valor de $\langle \Delta_z^2 \rangle$. Arriba: Las frecuencias de oscilación son ω_1 (triángulos), ω_2 (círculos), ω_3 (cuadrados), y ω_4 (diamantes). $\langle \Delta_z^2 \rangle$ en símbolos abiertos y $\langle \Delta_y^2 \rangle$ en símbolos sólidos (Sólo una frecuencia es mostrada, las otras son similares). Abajo: La frecuencia de oscilación es ω_3 . $\langle \Delta_z^2 \rangle$ (círculos sólidos) y $\langle \Delta_y^2 \rangle$ (triángulos abiertos).

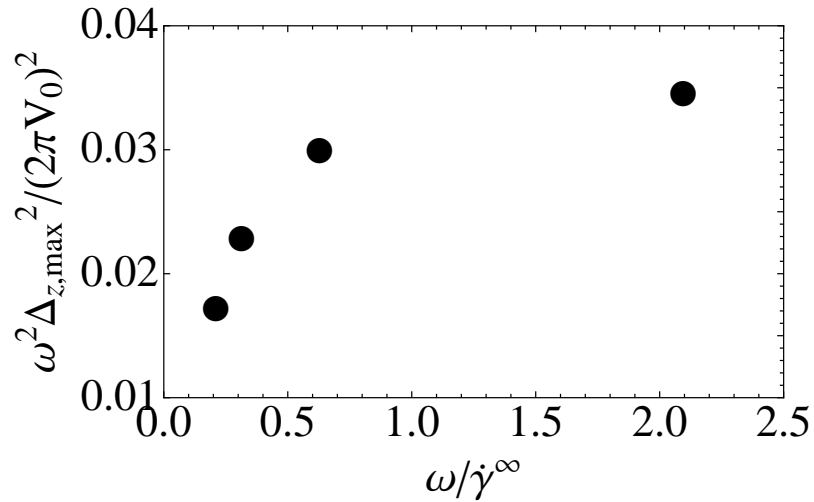


Figura 5.7: Desplazamiento coarse grained máximo en la dirección z como función de la frecuencia de oscilación, normalizada con la distancia avanzada en un periodo.

5.7. Conclusiones.

La dinámica de un sólo nadador moviéndose a bajo número de Reynolds es estudiado en presencia de un cizalle simple oscilatorio. En dispositivos microfluídicos, es sabido que las bacterias se aproximan para nadar cercanas a las superficies sólidas. Por lo tanto, el flujo actuando en un nadador puede ser modelado como un cizalle simple. Cuando las fluctuaciones en el fluido son tomadas en cuenta, la ecuación resultante para el vector director es no-lineal y el ruido es multiplicativo. Cuando analizamos el desplazamiento coarse grained de la bacteria, se observa resonancia estocástica. El desplazamiento en la dirección transversal es maximizado para una intensidad de ruido finita. La resonancia es ancha, por lo que es difícil obtener precisamente la intensidad de ruido resonante Γ^{res} . Basado en resultados para cuatro diferentes frecuencias se encuentra que $\Gamma^{\text{res}} \propto \omega$, con una constante de proporcionalidad pequeña. La resonancia estocástica observada implica que si el movimiento fuese difusivo, la difusividad transversal y la mezcla pudiese ser maximizada al variar la intensidad del ruido. Además, la orientación preferencial del vector director a lo largo del flujo puede tener efectos reológicos en la viscosidad dependiendo de la frecuencia. En el modelo, no hemos considerado la reorientación rápida de la bacteria (*tumbling*). El efecto del tumbling podría hacer el movimiento más isotrópico, y así reducir la amplitud de la resonancia. En adición, las interacciones hidrodinámicas con las superficies pueden afectar a resonancia. Finalmente, un análisis mas detallado

del proceso de SR es necesario para aislar los ingredientes necesarios para producir esta resonancia. Es, por decirlo menos, complejo debido a la gran cantidad de grados de libertad y las dos frecuencias intrínsecas , ω y $\dot{\gamma}$ en el problema.

Capítulo 6

Conclusiones

La principal motivación de este trabajo de tesis en un principio fue conocer la auto-difusión inducida por el cizalle de esferas pasivas en un régimen de Stokes. El modelo que utilizamos correspondía a hacer una expansión multipolar para las esferas en el fluido y quedarnos con el *stresslet*, es decir, con la parte simétrica del dipolo de fuerza. De esta manera las partículas correspondían a dipolos de fuerza en el fluido. Las interacciones hidrodinámicas que se desarrollan son de largo alcance, lo que no permite acotar las interacciones utilizando un cierto radio de acción, siempre por muy lejos que estén las partículas éstas se afectan unas con otras. Por esta razón en la literatura es común utilizar la suma de Ewald, ya que en un principio se utiliza un sistema infinito, pero en nuestro caso, debido a que sólo nos quedamos con la parte dipolar en la expansión multipolar no es necesario ir mucho más lejos ya que las interacciones se hacen despreciables para sistemas más grandes. Durante el desarrollo del problema nos dimos cuenta que a pesar de ser un sistema diluido, en donde las interacciones cercanas son poco probables, era necesario modelar los encuentros cercanos. Lo que no esperábamos era que la elección de esta fuerza pudiese determinar finalmente en cómo se desarrollaba el régimen difusivo, ya que cómo vimos los distintos modelos de esferas rugosas o fuerzas repulsivas de corto alcance, entre esferas, determinan en los sistemas diluidos si la difusividad varía linealmente con la fracción volumétrica de partículas o cómo el cuadrado de éstas. En nuestro caso encontramos que el tiempo que demoraba la suspensión en alcanzar el régimen difusivo dependía de la concentración volumétrica de esferas $\sim \phi^{-3/2}$ y que este proceso contenía un complejo régimen subdifusivo. El régimen difusivo final encontramos que era proporcional a ϕ^2 lo que concordaba con lo encontrado en la literatura.

Debido al desarrollo de los estudios en suspensiones activas en el último tiempo, y

a que estas también se encuentran en un régimen de Stokes, es que quisimos estudiar cómo afectaba a la difusividad de esferas pasivas la inclusión de partículas activas, en este caso de bacterias. Pero para incluir las bacterias era necesario tomar un modelo para éstas, que fuese fácil de incluir y que reprodujera el comportamiento de las bacterias. Es por esto que utilizamos el modelo desarrollado por Jocelyn Dunstan [48] y lo ajustamos para lo que necesitábamos, es por esto que el modelo de bacteria a utilizar correspondía al de una bacteria tipo cascabel, el que se modeló como dos fuerzas puntuales que formaban un dipolo de fuerzas en el fluido. Pero las bacterias, ya no sólo llevan asociada una ecuación para el desplazamiento también una para su vector director, en esta ecuación hay un parámetro geométrico que determina cómo rota esta partícula, y en el caso del modelo bacteria tipo cascabel encontramos que para cualquier elección en el tamaño de la cabeza o la cola este valor siempre era menor que cero, lo que nos daba cuenta que esta bacteria rotaba o se movía más cercano a un disco que a un organismo elongado. Aún así estudiamos la difusividad para este sistema en donde encontramos que independientemente si la suspensión mixta se encuentra bajo un cizalle simple o no, siempre la auto-difusión de partículas es mayor y más rápida que en el caso de tener sólo esferas pasivas, lo que nos permite concluir que incluir materia activa en estos sistemas permite acelerar estos procesos de transporte en suspensiones pasivas. Las bacterias en cualquier caso desarrollaban un régimen difusivo, el que en el caso de no tener un cizalle impuesto dependía de la concentración de esferas en la suspensión.

Por otro lado, el grupo del profesor Eric Clement en Francia, observó que una suspensión de bacterias sometidas a un flujo oscilante nadaban preferentemente en la dirección transversal al flujo. Para reproducir estos resultados fue necesario tomar un modelo de bacteria elongada, lo que nos llevó a desarrollar un modelo para bacterias infinitamente elongadas. Además el experimento fue realizado en un aparato microfluidico y la suspensión estaba bajo los efectos de las paredes, por lo que aproximamos el flujo como un cizalle simple oscilante.

Este problema, tomar una suspensión diluida de bacterias infinitamente elongadas expuestas a un cizalle oscilante, presentaba graves problemas con los traslapes entre bacterias. Debido a que el encuentro entre bacterias es más probable y a que la fuerza repulsiva de corto alcance entre bacterias no bastaba para prevenir que las bacterias se sintieran atraídas unas con otras, lo que hacia necesario incluir otras herramientas para prevenir los traslapes, entre estas herramientas era posible utilizar volúmenes excluidos por ejemplo. De todos modos, decidimos modelar la presencia de otras bacterias en el fluido como la presencia de ruido en el fluido. Lo que nos

llevó a estudiar bacterias con ruido multiplicativo y más tarde a encontrar resonancia estocástica en el nado transversal de las bacterias para un cierto rango de intensidad de ruido aplicado al sistema.

Como conclusión final, el cómo modelar de manera más efectiva y real las suspensiones activas diluidas a bajo número de Reynolds, sigue siendo un tema abierto y muy estudiado ya que no sólo depende de cómo se estudian las interacciones, sino también en cómo se modela las partículas o cómo se simulan estas suspensiones.

Las perspectivas de este trabajo se basan en hallar formas de mejorar la rapidez de integración de las ecuaciones por lo que se podrían mejorar los métodos numéricos para incluir suspensiones más densas, por ejemplo implementar la suma de Ewald y de esta forma estudiar los cambios en la viscosidad en suspensiones mixtas tanto de esferas de distinto tamaño cómo en suspensiones mixtas de esferas y bacterias. Por otro lado, estamos trabajando en la continuación del artículo publicado sobre resonancia estocástica en el desplazamiento transversal para una bacteria sometida a ruido multiplicativo, en el que queremos estudiar si existe una respuesta no-Newtoniana de la viscosidad con la frecuencia de oscilación del flujo, para el ruido resonante y así expandir el estudio de suspensiones de bacterias a través de este modelo propuesto para una bacteria en presencia de ruido multiplicativo.

Capítulo 7

Publicaciones

1. Aceptado

PHYSICAL REVIEW E **86**, 037301 (2012)

Stochastic resonance on the transverse displacement of swimmers in an oscillatory shear flow

Francisca Guzmán-Lastra and Rodrigo Soto
Departamento de Física, FCFM, Universidad de Chile, Santiago, Chile
(Received 31 May 2012; published 7 September 2012)

Self-propelled microorganisms, such as unicellular algae or bacteria, swim along their director relative to the fluid velocity. Under a steady shear flow the director rotates in close orbit, a periodic structure that is preserved under an oscillatory shear flow. If the shear flow is subjected to small fluctuations produced by small irregularities in the microchannel or by other swimmers nearby, the director dynamics becomes stochastic. Numerical integration of the swimmer motion shows that there is stochastic resonance: The displacement in the vorticity direction is maximized for a finite noise intensity. This transverse displacement resonance is observed when the displacement is coarse grained over several periods, although the director is preferentially oriented along the flow. The resonant noise intensity is proportional to the oscillation frequency and independent of the shear rate. The enhanced displacement can have effects on the transverse diffusion of swimmers and the rheology of the suspension.

DOI: [10.1103/PhysRevE.86.037301](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.037301)

PACS number(s): 47.63.Gd, 05.40.Ca, 47.63.mf

2. Enviado

Subdiffusive behavior of a dilute non-Brownian suspension under shear

Francisca Guzmán-Lastra and Rodrigo Soto

Departamento de Física, FCFM, Universidad de Chile, Casilla 487-3, Santiago, Chile

Shear-induced self-diffusion in a dilute suspension of non-Brownian spheres under a simple shear flow is studied in the limit of zero Reynolds number, for different volume fractions ϕ . Particles are simulated considering the first term in the multipolar expansion to take into account the long-range hydrodynamic interactions, and a repulsive force is added to avoid interpenetration. The final diffusive regime is established after long times ($t_{\text{diffusion}} \sim \phi^{-3/2}$), and the diffusion coefficient is proportional to ϕ^2 , as expected in the presence of the short-range repulsive force. Before the diffusive regime is established, there is a rich subdiffusive behavior, particularly in the gradient direction. Each pairwise hydrodynamic interaction is reversible, not leading to streamline migration. Due to the incoherence of the different pair interactions, a plateau in the mean square displacement is first observed, lasting for a period that increases as ϕ is decreased. Then, a first diffusive regime is established due to three-particle interactions, with a diffusion coefficient that goes as $D^{(1)} \sim \phi^{2.4}$. At longer times, a phenomenon similar to caging is observed. Particles remain for long times diffusing in the vicinity of some positions, and eventual large displacements are produced, moving the particle to a new position and resulting in transient large values of the kurtosis of the displacement distribution. This migration is produced by collisions through the repulsive potential. After several of those large displacements, the final diffusive regime is established.

PACS numbers: 83.80.Hj 47.57.eb 47.15.G-

Apéndice A

Relación entre matrices antisimétricas y productos vectoriales

Sean dos vectores \vec{a} y \vec{b} . El producto vectorial $\vec{c} = \vec{a} \times \vec{b}$ se define por componentes como

$$c_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k \quad (\text{A.1})$$

Donde ϵ_{ijk} es el tensor de Levi-Civita. Inspeccionando la expresión anterior, se define la matriz diádica $C = a \otimes b$ ($C_{ij} = a_i b_j$). En términos de ella el vector \vec{c} se escribe

$$c_i = \epsilon_{ijk} C_{jk} \quad (\text{A.2})$$

$$= \epsilon_{ijk} \left(\frac{C_{jk} + C_{kj}}{2} + \frac{C_{jk} - C_{kj}}{2} \right) \quad (\text{A.3})$$

$$= \epsilon_{ijk} (C_{jk}^S + C_{jk}^{AS}) \quad (\text{A.4})$$

$$c_i = \epsilon_{ijk} C_{jk}^{AS} \quad (\text{A.5})$$

donde se separó la matriz C en sus componentes simétrica (A) y antisimétrica (AS) y se usó que el tensor de Levi-Civita se anula al contraerse con una matriz simétrica.

De manera explícita, el vector \vec{c} se escribe

$$\vec{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 b_3 - a_3 b_2 \\ a_3 b_1 - a_1 b_3 \\ a_1 b_2 - a_2 b_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

por otra parte la matriz C^{AS} es

$$C^{AS} = \frac{1}{2} (C - C^T) = \begin{pmatrix} 0 & a_1 b_2 - a_2 b_1 & a_1 b_3 - a_3 b_1 \\ a_2 b_1 - a_1 b_2 & 0 & a_2 b_3 - a_3 b_2 \\ a_3 b_1 - a_1 b_3 & a_3 b_2 - a_2 b_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

de lo que se observa que \vec{c} y C^{AS} tienen la misma información pero ordenada de distinta manera. Son equivalentes en sentido matemático. Como contienen la misma información, debe ser posible invertir la expresión (A.5). Se supone

$$C_{ij}^{AS} = \lambda \epsilon_{ijk} c_k \quad (\text{A.8})$$

donde se debe encontrar la constante λ . Reemplazando (A.5) en (A.8) se tiene

$$C_{ij}^{AS} = \lambda \epsilon_{ijk} c_k \quad (\text{A.9})$$

$$= \lambda \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} C_{lm}^{AS} \quad (\text{A.10})$$

$$= \lambda \epsilon_{kij} \epsilon_{klm} C_{lm}^{AS} \quad (\text{A.11})$$

$$= \lambda (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) C_{lm}^{AS} \quad (\text{A.12})$$

$$= \lambda (C_{ij}^{AS} - C_{ji}^{AS}) \quad (\text{A.13})$$

$$= 2\lambda C^{AS} \quad (\text{A.14})$$

de donde se deduce que $\lambda = 1/2$.

Se tiene en resumen, que un producto vectorial se puede escribir de manera equivalente como un vector \vec{c} o una matriz antisimétrica C^{AS} que se relacionan entre sí por

$$c_i = \epsilon_{ijk} C_{jk}^{AS} \quad (\text{A.15})$$

$$C_{ij}^{AS} = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} c_k \quad (\text{A.16})$$

o en términos de sus componentes por

$$\vec{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.17})$$

$$C^{AS} = \begin{pmatrix} 0 & c_3 & -c_2 \\ -c_3 & 0 & c_1 \\ c_2 & -c_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

Referencias

- [1] F. Gadala-María y A. Acrivos, *J. Rheol.* **24**(6), 799-814 (1980).
- [2] D. Leighton y A. Acrivos, *J. Fluid Mech.* **181**, 415-439 (1987).
- [3] H. Hasimoto, *J. Fluid Mech.* **5**, 317-328 (1959).
- [4] Andrey Sokolov, Mario M. Apodaca, Bartosz A. Grzybowski e Igor S. Aranson, *PNAS* **107**, no. 3 969-974 (2010).
- [5] David Saintillan y Michael J. Shelley, *J. R. Soc. Interface*, **9** no. 68, 571-585 (2012).
- [6] Donald L. Koch y Ganesh Subramanian, *Annu. Rev. Fluid. Mech.* **43** 637-659 (2011).
- [7] S. Kim and S. J. Karrila, *Microhydrodynamics. Principles and Selected Applications* (Dover, New York, 2005).
- [8] C. Pozrikidis, *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow* (Cambridge Texts in Applied Mathematics, New York, 1992).
- [9] Élisabeth Guazzelli and Jeffrey F. Morris, *A Physical Introduction to Suspension Dynamics* (Cambridge Texts in Applied Mathematics, New York, 2012).
- [10] Y. Wang, R. Mauri, and A. Acrivos, *J. Fluid Mech.* **327**, 255 (1996).
- [11] F. Gadala-Maria and Andreas Acrivos, *J. Rheol.* **24**, 799 (1980).
- [12] F. R. Da Cunha and E. J. Hinch, *J. Fluid Mech.* **309**, 211 (1996).
- [13] G. Bossis and J. F. Brady, *J. Chem. Phys.* **87**, 5437 (1987).
- [14] A. Sierou and J. F. Brady, *J. Fluid Mech.* **506**, 285 (2004).

- [15] G. Drazer, J. Koplik, B. Khusid, and A. Acrivos, *J. Fluid. Mech.* **460**, 307 (2002).
- [16] T. Ishikawa and T. Yamaguchi, *Phys. Rev. E* **77**, 041402 (2008).
- [17] M. Zurita-Gotor, J. Blawdziecz, and E. Wajnryb, *J. Fluid. Mech.* **592**, 447 (2007).
- [18] M. Lopez and M. D. Graham, *Phys. Fluids* **19**, 073602 (2007).
- [19] I. E. Zarraga and D. T. Leighton, *Phys. Fluids* **14**, 2194 (2002).
- [20] E. S. Asmolov, *Phys. Rev. E* **77**, 066312 (2008).
- [21] G. Düring, D. Bartolo, and J. Kurchan, *Phys. Rev. E* **79**, 030101 (R) (2009).
- [22] J. F. Brady and G. Bossis, *Ann. Rev. Fluid. Mech.* **20**, 111 (1988).
- [23] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulations of Liquids* (Oxford Science, New York, 1987).
- [24] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulations. From Algorithms to Applications* (Academic Press, Boston, 2002), second edition.
- [25] E. R. Weeks and D. A. Weitz, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 095704 (2002).
- [26] P. M. Reis, R. A. Ingale, and M. D. Shattuck, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 188301 (2007).
- [27] Francisca Guzmán-Lastra and Rodrigo Soto, *Phys. Rev. E* **86**, 037301 (2012).
- [28] H. C. Berg, *E. coli in Motion*, Springer, New York (2004).
- [29] H. C. Berg, *Random Walks in Biology*, Princeton University Press, Princeton, NJ (1993).
- [30] Y. Hatwalne, S. Ramaswamy, M. Rao, R.A. Simha, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 118101 (2004).
- [31] B.M. Haines, A. Sokolov, I.S. Aranson, L. Berlyand, and D.A. Karpeev, *Phys. Rev. E* **80**, 041922 (2009).
- [32] D. Saintillan, *Experimental Mechanics* **50**, 1275 (2010).
- [33] D. Saintillan, *Phys. Rev. E* **81**, 056307 (2010).

- [34] S.D. Ryan, B.M. Haines, L. Berlyand, F. Ziebert, and I.S. Aranson, *Phys. Rev. E* **83**, 050904(R) (2011).
- [35] X.-L. Wu and A. Libchaber, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3017 (2000).
- [36] C. Valeriani, M. Li, J. Novosel, J. Arlt and D. Marenduzzo, *Soft Matter* **7**, 5228 (2011).
- [37] G. Miño, T. E. Mallouk, T. Darnige, M. Hoyos, J. Dauchet, J. Dunstan, R. Soto, Y. Wang, A. Rousselet, and E. Clement, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 048102 (2011).
- [38] D. Saintillan, Michael J. Shelley, *Phys. Fluids* **20**, 123304 (2008).
- [39] A.A. Evans, T. Ishikawa, T. Yamaguchi, and E. Lauga, *Phys. Fluids* **23**, 111702 (2011).
- [40] G. Subramanian and D.L. Koch, *J. Fluid. Mech.* **632** , pp. 359-400, (2009).
- [41] L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, and F. Marchesoni, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 223 (1998).
- [42] V. Berdichevsky, M. Gitterman, *Europhys. Lett.* **36** (3), pp. 161-165 (1996).
- [43] A. V. Barzykin, K. Seki, *Europhys. Lett.* **40** (2), pp. 117-121 (1997).
- [44] S. Kim and S. J. Karilla, *Microhydrodynamics: Principles and selected applications*, Dover, New York (2005).
- [45] J. Happel and H. Brenner, *Low Reynolds Number Hydrodynamics with Special Applications to Particulate Media*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ (1965).
- [46] G. B. Jeffery, *Proc. R. Soc. A* **102**, 161 (1922).
- [47] A. P. Berke, L. Turner, H. C. Berg, and E. Lauga, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 038102 (2008).
- [48] J. Dunstan, G. Miño, E. Clement, and R. Soto *Phys. Fluids* **24**, 011901 (2012).
- [49] M. Ramia, D.L. Tullock, and N. Phan-Thien, *Biophys.* **65**, 755 (1993).
- [50] P. D. Frymier, R. M. Ford, H. C. Berg, and P. T. Cummings, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **92**, 6199 (1995).

- [51] E. Lauga, W. R. DiLuzio, G. M. Whitesides, and H. A. Stone, *Biophys. J.* **90**, 400 (2006).
- [52] G. Li, L.-K. Tam, and J.X. Tang, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105**, 18355 (2008).
- [53] Material suplementario online para el artículo [27].
- [54] P. E. Kloeden, E. Platen, *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*, Springer-Verlag, Berlin (1992).
- [55] C. Van den Broeck, J. M. R. Parrondo, R. Toral, R. Kawai, *Phys. Rev. E* **55**, 4 (1997).
- [56] A. Franceschini, E. Filippidi, E. Guazzelli, D.J. Pine, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 250603 (2011).
- [57] M. Gitterman, *The noisy Oscillator the first hundred years, from Einstein until now*, World Scientific Publishing, Singapore (2005).
- [58] N.G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, Elsevier, Amsterdam (2007).
- [59] Takuji Ishikawa, M. P. Simmonds and T. J. Pedley, *J. Fluid Mech.* **568**, pp. 119-160 (2006).
- [60] J. E. Avron, O. Gat, and O. Kenneth, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 18 (2004).
- [61] C. M. Pooley, G. P. Alexander, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 228103 (2007).
- [62] Aparna Baskaran and M. Cristina Marchetti, *PNAS* **106**, No. 37, 15567-15572 (2009).
- [63] Knut Drescher, Jörn Dunkel, Luis H. Cisneros, Sujoy Ganguly, and Raymond E. Goldstein, *PNAS* **108**, No. 27, 10940-10945 (2011).
- [64] Vitaliy Gyrya, Igor S. Aranson, Leonid V. Berlyand, Dmitry Karpeev, *Bulletin of mathematical biology* **72**, 148-183 (2010).
- [65] Piero Olla, *Phys. Rev. E* **82**, 015302(R) (2010).
- [66] Renaud Trouilloud, Tony S. Yu, A. E. Hosoi and Eric Lauga, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 048102 (2008).

- [67] Nicholas Sambelashvili, A.W.C. Lau and David Cai, *Phys. Phys. Lett. A* **360**, 507-511 (2007).
- [68] Neil H. Mendelson, Adrienne Bourque, Kathryn Wilkening, Kevin R. Anderson and Joseph C. Watkins, *Journal of bacteriology*. **181**, No. 2, pp. 600-609 (1999).
- [69] Takuji Ishikawa and T. J. Pedley, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 088103 (2008).
- [70] E. M. Purcell, *Am. J. Phys.* **45**, No. 1, (1977).
- [71] David Saintillan, Eric Darve and Eric S. G. Shaqfeh, *Phys. Fluids* **17**,033301 (2005).
- [72] Juan P Hernandez-Ortiz, Patrick T Underhill and Michael D Graham, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 204107(2009).
- [73] Sriram Ramaswamy, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys*, **1**, 323345, (2010).