



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Modelamiento de la quimiotaxis en una suspensión de partículas auto-propulsadas en confinamiento

Juan David Torrenegra rico

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Minas, Escuela de Materiales y Minerlaes
Medellin, Colombia
Año 2018

Efecto de la quimiotaxis sobre la dinámica y correlaciones en una suspensión activa de partículas auto-propulsadas en confinamiento

Juan David Torrenegra Rico

Tesis o trabajo de grado presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ingeniería de Materiales y Procesos

Director:

Ph.D. Juan Pablo Hernandez Ortíz

Co-director:

Ph.D. Jarol Esneider Molina

Línea de Investigación:

Termodinámica de no equilibrio y Fluidos complejos

Grupo de Investigación:

Ciencia y Tecnología de Materiales

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas, Departamento de Materiales y Minerales

Medellín, Colombia

Año 2018

Dedicatoria

A mi madre Clara Ines Rico , quien me inspiro debido a su tesón y talante, sin su invaluable cariño, apoyo moral, económico y ejemplo de una mujer empoderada e independiente me permitio terminar este trabajo. A mi prima Monica A. Satizabal quien en muchas ocasiones me ayudo sin importar la situación en la que me encontraba, y quien fue determinante en la culminación de este proyecto.

Agradecimientos

A mi Madre por todo su Apoyo y soporte durante toda mi vida academica, quien a pesar de la situacion siempre upo sacar mi familia y nuestro proyectos a delante. A mi prima Monica por su apoyo emocional y economico. A mi Tío Eduardo por su colaboracion economica y estancia en Alemania. Al profesor Juan P. Hernandez Ortíz por su guianza, valiosas discusiones y apoyo economico durante el desarrollo de este trabajo, al Ph.D Jarol E. Molina Mosquera por su paciencia, valiosas discusiones, aportes Numericos y Computacionales y apoyo economico durante este trabajo. A los compañeros del Grupo de investigacion Especialmente a Daniel Maldonado, Stiven villada, Cristina Agudelo y Alejandro Olaya por su amistad y valiosas aportes sobre los topicos que me sirvieron durante la construccion del modelo teorico, desarrollo de codigos y visualizacion de resultados. Al Doctor Francisco Valencia Alaix, quien me dio soporte economico cuando mas lo necesitaba.

Resumen

Las suspensiones activas deben su movimiento a la conversión de energía química en energía mecánica, esto se manifiesta como una fuerza constante sobre cada partícula de la suspensión. El movimiento autónomo de cada partícula en la suspensión, conduce al surgimiento espontáneo, y fuera del equilibrio de la formación de estructuras ordenadas y patrones de flujo lo que facilita su actividad en una escala pequeña del orden de micras. Las suspensiones de células microbianas o catalizadores auto-propulsados son ejemplos de suspensiones activas, y su dinámica de auto-ensamble controla la organización, función ecológica y dinámica de la población en escalas más grandes que el tamaño de un solo individuo. En cada caso, microorganismos o partículas activas, se presenta un movimiento aleatorio en presencia de concentración de sustancias en el fluido necesarias para su movimiento o procesos celulares, este movimiento se conoce como quimiotaxis. La quimiotaxis, en el caso de células bacterianas, está compuesto por dos movimientos *Run – Tumbling*. El *Run* es un movimiento lineal de duración aleatoria, mientras que, el *Tumbling* es una rotación aleatoria después de un *Run* y ocurre de forma aleatoria. En células microbianas y catalizadores activos, la quimiotaxis junto a las interacciones hidrodinámicas, y volumen excluido induce a el surgimiento de movimientos colectivos similares a la agregación, formación de bandas, estrias o plumas de partículas activas. Estos movimientos colectivos están asociados a estructuras de flujo complejo, que ayudan a mezclar especies químicas, sustratos o partículas pasivas en la suspensión.

El análisis químico en la pequeña escala ofrece muchas ventajas si se comparan con procesos convencionales, dichas ventajas son: reducción de tiempo de análisis y aumento en la resolución analítica. Sin embargo, la mezcla de reactivos en estos dispositivos no es eficiente por métodos tradicionales, razón por la cual la mezcla de reactivos es un desafío tecnológico para la utilización de estas técnicas.

Las características de las suspensiones activas con quimiotaxis, antes mencionadas, hacen que estas sean una potencial solución para mezcla de especies químicas en dispositivos microfluidicos usados para análisis químico, transporte de medicamentos en torrentes sanguíneos, secuenciación de moléculas de interés biológico, entre otras aplicaciones, ... etc. Desde la teoría se ha tratado de estudiar el efecto de la quimiotaxis sobre suspensiones confinadas con quimiotaxis, mediante diferentes aproximaciones y modelos computacionales. Los modelos más conocidos son los discretos y continuos: los modelos discretos, permiten determinar el comportamiento de una suspensión modelando las partículas activas como un punto discreto con quimiotaxis pero sin incluir la hidrodinámica, estos modelos hacen uso de técnicas de la dinámica molecular y de dinámica de partículas disipativa; por otro lado los modelos, basados en funciones continuas, permiten determinar los campos de velocidad y concentración de bacterias basados en una descripción fenomenológica del fluido, pero no pueden capturar

el efecto del movimiento colectivo.

En el presente trabajo se desarrolló un modelo meso-escala para una suspensión de partículas auto-propeladas en confinamiento, considerando la quimiotaxis y las interacciones hidrodinámicas y de corto alcance. El modelo mínimo de nadador se compone de una parte discreta y una continua. La partícula (parte discreta) se representa mediante un dipolo de fuerzas, unidos por un resorte rígido, propelado por una fuerza continua; El dipolo es sometido a interacciones estéricas y de origen disipativo como el arrastre debido a un fluido (parte continua); La quimiotaxis se implementó como un modelo mínimo, donde el dipolo cambia de dirección de forma aleatoria *Run – Tumbling* en presencia de un escalar (parte continua) con una distribución inicial y difusividad específicas. El modelo se resolvió con un método que permite encontrar funciones de Green en sistemas multi-escala conducidos por la difusión de una especie química, llamado Fick-GgEm (General geometry Ewald like method).

Mediante la implementación de este modelo se observó que la concentración de partículas, las condiciones iniciales (y de frontera), la difusividad de la especie química y la presencia de quimiotaxis, influye en la dinámica de la suspensión formada por agregados de partículas, disminuyendo el tiempo de mezclado y los coeficientes de movilidad del sistema.

Palabras clave: Suspensiones activas, Hidrodinámica a Bajos Re , Movimiento colectivo, funciones de autorrelación, sistemas disipativos, quimiotaxis.

Abstract

Active suspensions can move by the conversion of chemical energy (from surroundings) into mechanical energy, these can drive the emergence collective motion, spontaneous interactions between particles, forming a self assembly phenomenon and fluid flow complex patterns. These increase the suspension movement on the scale of microns. Bacterial cell suspensions or catalytic particle are suspensions which their self-assembly dynamics can control the organization, biological function and population movements. These control can be depend on chemotaxis of active particles. Chemotaxis that is, a the movement of populations depending on concentration of chemical species. The above features makes active suspensions a potential solution for the mixing problem in microfluidic devices.

The chemical analysis in micro scale, it offers many advantages compared with conventional processes, those advantages are: reduction of analysis time and increase analytical resolution. However, the mixing of reagents in these devices is not enough efficient using traditional methods. For this reason the mixture of reagents (in the micro-scale) is a technological challenge. The use of active fluids, can improve the transport of chemical species in the microscale and confined geometries. But the effect of the chemotaxis on the confined suspension is not well

undrestood. From soft matter theory has been implementing computational models in order to study those complex systems. Many computational approaches has developed for this. The wall used are the discrete and continuous approaches: the discrete approach allow observe the evolution of behavior of an active suspension, through modeling active particles like point-forces moving by chemotaxis but without long-range interactions, like hydrodynamic interaction (Dynamics Molecular, Model is Biseck); On the other hand, the models based on continuous functions, based on phenomenological description can solve fluid flow from the ensemble of particles, but without the physics of collective motions (Smoluchowski, Navier Stokes).

In the present work, we show a mesoscale model of Self-propelled particles in confinement, taking account the chemotaxis and Hydrodynamic interactions. The model is a suspension of force-dipole composed by a dumbbell (discrete part) represented by a two beads with joined by a spring, and self-propelled by a continuous force in confinement by a periodic box (in two directions); The dipole movement is randomly (Run-tumbling), in the presence of chemical field (continuous part). The Continuous part are balance equations for fluid flow and chemical species concentration. The discrete and continuous part are solved through with a novel method, based on Green function formulation, for resolve the hydrodynamic and chemotactic interactions of particles on confinement, in an efficient way. The method is called GgEm (General Geometry as Ewald's method)

By the implementation of this method we observed that the volumetric fraction of particles, the initial conditions (and border), the diffusivity of the chemical species and the presence of chemotaxis, influence the dynamics of the suspension, like cluster formation, decrease of mixing time and mobility of the suspension.

key words: Active suspension, Low *Re* Hydrodynamic, Collective motion, Auto-correlated functions, chemotaxis.

Índice general

Agradecimientos	IV
Resumen	v
1. Introducción	2
2. Estado del Arte:	9
2.1. Quimiotaxis	12
2.1.1. Modelos para simular la quimiotaxis de partículas activas	13
2.2. Modelos de suspensiones de nadadores activos con y sin quimiotaxis	14
3. Marco de Referencia-Hidrodinamica de suspensiones activas	21
3.1. Hidrodinámica de suspensiones de partículas a bajos numeros de Re	21
3.1.1. Sumas de Ewald Para Stokeslets	26
3.1.2. Efecto de las superficies solidas	28
4. Metodología y Diseño de Experimentos	30
4.1. Modelo Mínimo para un nadador	30
4.1.1. Balance de Fuerzas	31
4.1.2. Stokeslet para una suspensión confinada	34
4.1.3. Ecuación de balance para el escalar	35
4.1.4. Quimiotaxis y Probabilidades	36
4.1.5. Adimensionalización de variables: Tamaños y Tiempos Caracteristicos	37
4.2. Metodo de Solucion Hidrodinamica GGEM	39
4.2.1. Solucion \mathbf{u}_{far} y del campo de concentracion en el espacio de Fourier	41
4.3. Diseño de Experimentos	42
4.3.1. Parametros y Condiciones de Simulación	43
4.3.2. Definición de las funciones de auto-correlacion para el fluido y de la dinámica de los nadadores	46

5. Resultados	53
5.1. Suspensiones NI	53
5.2. Resultados Quimiotaxis	64
5.2.1. Listado de observaciones Sistema RT	74
5.3. Efecto de las condiciones iniciales del escalar	87
5.4. Efecto de la Variación del tamaño del canal H	88
6. Conclusiones y recomendaciones	94
6.1. Recomendaciones	95
A. Anexo: Derivació de la fuerza debido a un potencial de Gay-Berne	96
B. Anexo: Transformada rapida de Fourier discreta (DFFT)	99
C. Anexo: Metodo Hibrido Diferencias Finitas-DFFT	102

Capítulo 1

Introducción

Los fluidos activos son suspensiones de partículas autopropulsadas o activas, que pueden ser catalizadores, coloides o microorganismos motiles que comparten una característica en común, y es la conversión de energía química del medio circundante en energía mecánica (cinética) para moverse a través del fluido circundante, de tal forma que cada partícula o célula imprime una fuerza externa y constante al fluido para desplazarse Figura 1-1 [1], [2], [3], [4], [5].

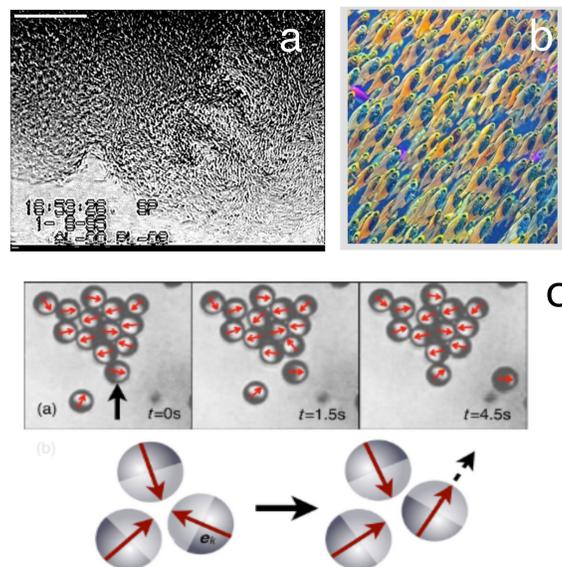


Figura 1-1: Ejemplos de suspensiones de partículas activas el movimiento colectivo (a) Colonias de bacterias móviles (b) Banco de peces (c) Partículas de Janus tomado de (Referencias).

En suspensiones activas con alta concentración de partículas autopropulsadas, el movimien-

to colectivo de todas las partículas induce al surgimiento espontaneo de autoensambles, es decir estructuras o agregados de partículas con una forma particular, que fluctúan con el numero de individuos que la componen [2]. La naturaleza estos auto-ensambles conducen a la formación de estrías , vórtices, nubes, plumas, todas compuestas por partículas activas que interactuan mediante la hidrodinámica, quimiotaxis, electrostatica, magnestostatica ... etc, [6], [7], [8], [9], [10], [11].

Como los auto-ensambles surgen esponataneamente, debido a las fluctuaciones de densidad y las interacciones entre las partículas, los auto-ensambles son considerados como un fenómeno fuera del equilibrio termodinámico [12], [11], [13], [14], [15]. Las fluctuaciones de densidad, por otro lado, tienen un origen térmico y por las diferentes interacciones entre las partículas, como interacciones estéricas, interacciones en campos disipativos y las interacciones con campos o estímulos externos [11], [16], [17], [18].

Los fenómenos colectivos de las suspensiones activas son diferentes a los presentes en sistemas de partículas brownianas. Esto se debe a que las fluctuaciones de suspensiones activas son mucho mayores a las presentes en suspensiones brownianas, las fluctuaciones de estas ultimas tienen un orden de $\Delta N \sim \sqrt{N}$, donde N es el numero de partículas, mientras que, para suspensiones activas son de un orden $\Delta N \sim N^\alpha$ y $0,5 < \alpha < 1$ [19], [6], [20]. Como la velocidad de las partículas motiles de un tamaño caracteristico l (del orden de micras μm) es superior a la velocidad generada por ruido térmico $\frac{k_B T l}{\zeta}$ (donde $k_B T$ es la constante de Boltzman y ζ el coeficiente de arrastre de las partículas), las suspensiones activas sufren de un incremento del numero de las interacciones entre partículas, lo que incrementa las fluctuaciones [2], [8], [21]. Debido a esto las suspensiones activas tienen fluctuaciones que no tienen un origen térmico [19], [22], [23], [15]. El origen de las fluctuaciones de sistemas fuera del equilibrio se debe principalmente a las siguientes interacciones:

- Interacciones de volumen excluido (estéricas) entre las partículas (interacciones de corto alcance) [24], [25].
- Interacciones con un campo escalar como una sustancia química, un campo vectorial como campos eléctricos o magnéticos en el medio. Mediante dichas interacciones las partículas responden al estímulo cambiando su dirección de movimiento, hacia el estímulo (positivo) o en contra de él (negativo), ejemplo de esto es la quimiotaxis o magnetotaxis [26], [27], [28], [29].
- Interacciones hidrodinámicas que son interacciones de largo alcance entre partículas y entre partícula-superficie solida, otras son las interacciones electrostáticas y magnetostáticas [30], [31], [32].

De todas las interacciones de la lista, las hidrodinámicas tienen un rol fundamental, debido a que son interacciones presentes en medios disipativos como el agua cuando una partícula embebida en el medio se mueve, también son las responsables de que una partícula influya en la trayectoria de las demás partículas de forma instantánea [33], [34], [35], [27], [6]. Son interacciones de largo alcance debido a que decaen más lento que r^{-d} , donde d es la dimensionalidad del sistema. Para una concentración de partículas activas alta $\Phi > 0,3$ o intermedia $\Phi > 0,1$ (Φ es la fracción volumétrica de partículas) el efecto de estas interacciones genera patrones o estructuras coherentes de flujo de fluido como vórtices, jets, dispersiones, ... etc, [36], [37], [24]. Estos flujos facilitan el transporte y actividad de las partículas activas, a pesar de que en la escala de las mismas los efectos viscosos superan a los inerciales [38], [39], [40], [41], [42], [43], [44], [45], [46].

Para una partícula activa, que en este trabajo denotaremos como nadador, de tamaño característico del orden de micras $l_{\text{swim}} \sim 1\mu\text{m}$, suspendida en agua y con una velocidad $10\mu\text{m}/\text{seg} < V_{\text{swim}} < 30\mu\text{m}/\text{seg}$ tiene un número de Reynolds de $Re \sim 0$, donde $Re = V_{\text{swim}} l_{\text{swim}} \rho / \mu$, por lo tanto uno de los mayores inconvenientes es la ausencia de inercia, por lo que su movimiento estaría limitado por fuerzas viscosas [47], [33], [3], [48], [31], [49], [50], [51]. Por lo anterior, el flujo generado por un nadador es reversible e instantáneo, por lo que un nadador no puede desplazarse con movimientos convencionales (repetitivos), como si lo haría en una escala más grande ($Re \gg 0$) [47], [50], [52], [25]. En el caso de células bacterianas o microorganismos motiles, los movimientos no recíprocos del flagelo, cilios o cuerpo celular, pueden romper la reversibilidad del medio impuesta por $Re \sim 0$ [47], [53], [54], [55]. Otro tipo de partícula activa son los catalizadores activos, su movimiento está determinado por reacciones químicas que ocurren entre sustancias en el medio y la superficies de los catalizadores, estas reacciones generan fenómenos electroosmóticos o difusioforéticos que impulsan a los catalizadores en favor del gradiente de concentración del reactivo, como es el caso de las partículas de Janus, catalizadores de platino, etc ... [56], [57], [3], [5], [58], [17].

El efecto del movimiento de suspensiones de microorganismos como *Bacillus subtilis*, *E. coli*, *Serratia marcescens*, *Volvox*, *C. reinhardtii*, espermatozoides, o de catalizadores como partículas de Janus y catalizadores de Pt, es el aumento de la velocidad del fluido en varios órdenes de magnitud por encima de la velocidad de los nadadores (células o partículas), como consecuencia la longitud que recorre un solo individuo (célula o catalizador) aumenta en una escala mayor a la longitud característica de del nadador [50], [59], [31], [51], [4]. Esto se debe a las interacciones hidrodinámicas, que permiten sumar las contribuciones sobre una partícula debida a las demás partículas, por lo que causa una perturbación en la posición de las demás. Las interacciones hidrodinámicas tienen un orden r^{-3} , así que el movimiento de una partícula afecta el movimiento de las demás en largas distancias [38], [50], [52], [31], [13], [60].

A pesar un nadador tiene $Re \sim 0$, y que en la escala del nadador, el transporte difusivo de una especie química es ineficiente en distancias superiores al tamaño del nadador, una característica de los flujos generados por la suspensión de nadadores, en concentraciones semidilutas ($0,1 < \Phi \leq 0,3$) o densas ($\Phi > 0,3$), es que los patrones del flujo son similares a los patrones de flujos caóticos (turbulentos) y estos patrones de flujo favorecen la dispersión de partículas y la mezcla de especies químicas en el medio [48], [32], [34], [24], [61]. En el caso de nadadores que dependan de estas sustancias químicas para su movimiento, la mezcla o dispersión de la sustancia en altas concentraciones de nadadores se debe a la formación de movimientos colectivos que podrían ser generados por la quimiotaxis [9], [10], [62], [63], [6], [64], [65], [66]. El transporte y mezcla de sustratos, de forma eficiente en escalas micrométricas es una característica de las suspensiones de células microbianas. En el caso de catalizadores o nadadores sintéticos, la mezcla de sustratos favorece un movimiento constante, debido a las reacciones químicas, a su vez el movimiento constante facilita la agregación de partículas catalíticas auto-impulsadas [67] [44], [68], [69], [70], [46], [57], [3]. En ambos casos, suspensiones de microorganismos y suspensiones de catalizadores sintéticos autopropulsados (que se llamaran como nadadores), experimentan interacciones entre ellos, los nadadores, y entre los nadadores y el medio en que se encuentran. Las interacciones entre el medio y los nadadores se dan debido a campos de concentración de sustratos, campos magnéticos, campos gravitacionales, campos eléctricos etc,.... Estos campos pueden ser externos o generados por los nadadores en el medio. La interacción entre nadadores está determinada por medio de estos campos e influye en la trayectoria de movimiento en cada nadador y a su vez sobre toda la suspensión (vía interacciones hidrodinámicas) produciendo los movimientos colectivos y fluctuaciones en la densidad que a su vez favorecen su biológica [18], [14], [61].

En suspensiones de nadadores, que interactúan o no con un campo externo, es común que el movimiento y trayectoria de los nadadores, afecte las propiedades de transporte aparente del todo el sistema como la viscosidad, la disminución o aumento de la movilidad de partículas activas y la difusividad de trazadores presentes (estos últimos se usan para caracterizar trayectorias de flujo en suspensiones) [71], [32], [72], [73], [48], [74].

Por lo anterior, la trayectoria de nado de los nadadores, que dependa de la interacción individual de los nadadores con campos externos se conoce como Taxis [75].

Los diferentes tipos de Taxis más conocidas en células microbianas o catalizadores activos son:

- Quimiotaxis: movimiento en función de gradientes de concentración de sustratos.
- Magnetotaxis: movimiento en función de campos magnéticos externos.
- Aerotaxis: movimiento en función de gradientes de concentración de O_2 disuelto.
- Girotaxis: movimiento en función de campos gravitacionales.

- Phototaxis: movimiento u activación del movimiento en función de frecuencias de luz.

En microorganismos y catalizadores activos, la quimiotaxis es un movimiento que se compone de desplazamientos rectilíneos de una duración aleatoria, conocida como *Run*, seguido por orientaciones en direcciones y una duración aleatorias que es conocida como *Tumbling*, la quimiotaxis es un movimiento de *Run – Tumbling* [27], [76], [77], [78] [75], [3]. La frecuencia de los *Run* y la de los *Tumbings* en células bacterianas está determinada por un gradiente de concentración Figura 1-2(b). En catalizadores, por otro lado, el movimiento de *Run – Tumbling* está determinado por la disponibilidad de reactivo en el medio el medio, como ejemplo los catalizadores de *Pt* aumentan su movimiento y velocidad al aumentar el peróxido de hidrógeno en el medio Figura 1-2(a).

La quimiotaxis es similar al movimiento browniano, pero la fluctuación en la posición y dirección de la partícula (nadador) no tiene un origen térmico.

El acople entre un tipo de Taxis, interacciones estéricas, e interacciones hidrodinámicas producen fenómenos colectivos espontáneos, algunos reportados en suspensiones concentradas o semidilutas de *Bacillus subtilis*, *Magnetococcus marinus* o *C. reinhardtii*, *S. marcescens*, como inestabilidades el flujo de fluido, formación de plumas o nubes de concentración de nadadores (células). [64], [36], [26], [79], [80]. Efectos similares han sido reportados en suspensiones de catalizadores activos [17], [54], [2], [81].

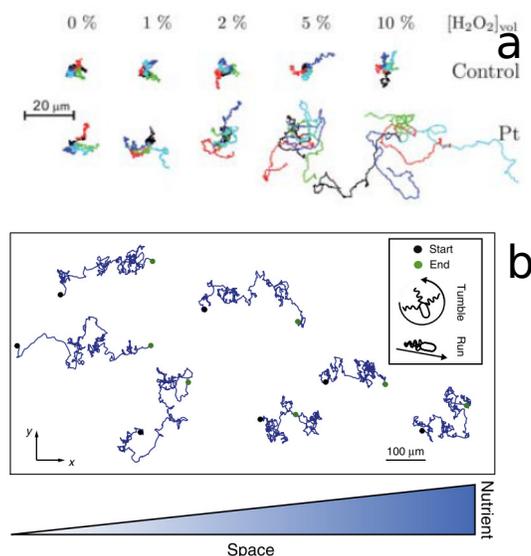


Figura 1-2: Ejemplos quimiotaxis (a) camino aleatorio generado catalizadores de Pt en presencia de H₂O₂ (b) quimiotaxis en células bacterianas en presencia de un campo de concentración de nutriente o sustancia quimioatrayente.

El confinamiento al que inevitablemente se someten estas suspensiones para la obtención de resultados experimentales, tienen efectos muy influyentes sobre la dinámica de la propia suspensión, debido a que la interacción con las paredes genera un cambio en las estructuras de flujo, acumulación de partículas activas en las paredes y mejoramiento del transporte de trazadores [34], [82], [83], [84], [85], [86], [87]. En presencia de superficies sólidas las partículas activas experimentan fenómenos de migración hacia las paredes, debido a la interacción hidrodinámica que experimenta la partícula activa [82], [83]. Al aproximarse y alinearse con la superficie sólida, las partículas se mueven describiendo trayectorias circulares [68], [45]. La acumulación de células en las paredes de un canal y los flujos caóticos que mejoran la mezcla de nutrientes, son las condiciones necesarias para la formación de bio-películas y favorecen el crecimiento y actividad de una población de microorganismos sobre superficies sólidas.

El análisis químico en dispositivos microfluídicos ofrece muchas ventajas comparados con métodos tradicionales como: reducción del tiempo de análisis, incremento del número de muestras procesadas y aumento de la resolución analítica, debido a su tamaño que permite miniaturización de procesos [57], [88]. Una aplicación de dispositivos microfluídicos es la relacionada con la secuenciación de macromoléculas de interés biológico como DNA, RNA o proteínas [85], [89]. Sin embargo la mezcla de reactivos en estos dispositivos no es eficiente por métodos convencionales ($Re \sim 0$) por lo que, procedimientos de mezcla eficiente en estos dispositivos es un desafío tecnológico [10], [90]. En este orden de ideas, la manipulación y el control de suspensiones activas, pueden aplicarse en la mezcla de especies químicas en pequeña escala y sistemas confinados [91], [92], [88], [93], [25], [92], [3], [57], [93].

Para evitar todos los desafíos experimentales que conlleva el diseño de dispositivos microfluídicos, las simulaciones computacionales son una alternativa para describir y predecir el comportamiento de estos sistemas. Sin embargo existen inconvenientes en la velocidad de convergencia, robustez y eficiencia computacional de modelos usados para describir el comportamiento de suspensiones activas confinadas considerando (hidrodinámicas y electrostáticas) [94], [30]. Un método desarrollado recientemente, para incluir las interacciones de largo alcance en suspensiones de partículas confinadas, y que es eficiente computacionalmente, es conocido como GgEm (General geometry Ewald like method) [31], [32], [95]. Este método está basado en el esquema de funciones de Green a través de las sumas de Ewald y permite calcular interacciones entre N partículas de un orden $N \log(N)$.

Este trabajo se estudiara la dinámica de una suspensión de nadadores confinados en un canal Periódico, que interactúan con un campo de concentración, con diferentes tipos de condiciones iniciales el cual es transportado por el flujo de fluido generado por los nadadores. La implementación de la quimiotaxis, debido al complejo proceso de transducción de señales o cinéticas de ligando receptor o reacciones químicas (en el caso de catalizadores),

se implementara como un modelo simple: el nadador tendra una respuesta *Run* o *Tumbling* comparando la concentración del dominio de simulación con un umbral de concentración establecido, esta simplificación se realizará con el fin de estudiar el impacto fisico del *Run* y *Tumbling* sobre la suspensión. El modelo se resolvera mediante la implementación de GgEm incluyendo la ecuación de transporte de Fick, el modelo se modificado se conoce como Fick-GgEm para particulas autopropulsadas.

Capítulo 2

Estado del Arte:

El tamaño característico de un nadador en un medio viscoso impone que $Re \sim 0$, por lo tanto su movimiento está libre de inercia [50]. Los microorganismos motiles y catalizadores activos pueden desplazarse en un medio viscoso, mediante el movimiento de sus flagelos o las reacciones químicas en la superficie [96], [29]. En el caso de microorganismos como células bacterianas, espermatozoides, algas y protozoos el movimiento de sus flagelos y cilios, es responsable de su mecanismo de locomoción. La fuerza que imprimen al medio es constante en el tiempo, y es una fuerza que cada célula imprime al medio sin la necesidad de un estímulo externo. Esta clase de partículas o nadadores que pueden ser o no de origen biológico son llamadas activas o auto-propulsados. [96], [97], [51]. Muchas de estas partículas se encuentran en escalas del orden de micras (μm), por lo que pueden ser considerados como puntos móviles. Una representación física simple para describir el movimiento de una suspensión de nadadores, es considerar el efecto sobre el flujo en distancias muy largas (más que su tamaño característico). Por lo tanto, una aproximación válida es considerar al nadador como un dipolo puntual de fuerzas (o distribuciones de puntos de fuerza) separadas una distancia l [32], [51], [98]. En la Figura 2-1 se aprecia como dos microorganismos motiles Figura 2-1(a-b) pueden ser representados como puntos de fuerza Figura 2-1(c-d). Como el fluido en que se mueve la partícula es no-inercial, la perturbación en el fluido es instantánea y decae en distancias del orden de $\sim r^3$. Una partícula en un medio viscoso puede verse perturbada de forma instantánea, por el movimiento de otra partícula separada una distancia r . La aproximación de partículas como puntos de fuerza es una consecuencia de la naturaleza de las longitudes de las interacciones hidrodinámicas entre nadadores. [39].

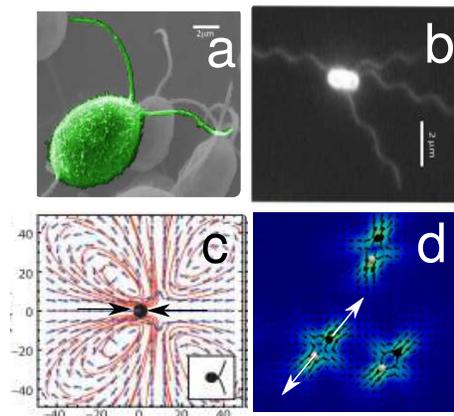


Figura 2-1: Ejemplos de suspensiones de partículas activas el movimiento colectivo (a) *Chlamydomonas reinhardtii* (b) *E. coli* (c) Campo de velocidades de un Puller (d) Campo de velocidades de un Pusher.

La forma del dipolo depende del tipo de nadador a describir. Para bacterias (nadadores) como *E. coli*, *S. marcescens*, *B. subtilis* (o bacterias de forma alargada como bacilos y espirilos) el flujo de fluido sale de los extremos, es decir las fuerzas tienen direcciones opuestas en el dipolo, las partículas que tengan este campo de velocidades son llamadas *Pusher* Figura 2-1(d); mientras que, para algas como *Chlamydomonas reinhardtii*, el flujo de fluido entra hacia los extremos, las fuerzas del dipolo se contraponen una frente a otra, este tipo de nadadores o partículas (esféricas en muchos casos) son llamados *Puller* Figura 2-1(c) [30], [51], [99], [100], [21], [98]. El campo de velocidades generado por ambos dipolos (de Pullers y Pushers) y el movimiento colectivo derivado, tiene efectos sobre los coeficientes de transporte aparente como la difusividad, movilidad y viscosidad de la suspensión de nadadores, las suspensiones de Pushers mejoran la difusividad de trazadores en el medio en función de la cantidad de nadadores presentes [43], [101], [72], [73], [71], [102], [41], [40]. Varios estudios, teóricos y experimentales, han demostrado que parámetros como la cantidad de nadadores tipo Pushers (medida como fracción volumétrica), tamaño del sistema, velocidad de nado de los nadadores afectan la difusividad de una suspensión activa y del fluido (medio con trazadores) [32], [48], [61], [72], [73]. Sin embargo en suspensiones activas con quimiotaxis, no se conoce el efecto de la difusividad de una sustancia quimioatrayente, el efecto del tamaño del canal y la distribución inicial de la sustancia quimioatrayente, esto las condiciones iniciales del escalar, sobre la dinámica de la suspensión de nadadores.

Una característica de las suspensiones activas, es que en concentraciones densas o semidiluidas de nadadores, los flujos como vórtices y jets generados hacen que el campo de velocidades sea caótico, siendo un similar de los flujos turbulentos pero en pequeña

escala. Se ha reportado presencia de estos campos de velocidad caóticos en suspensiones concentradas de *Bacillus subtilis*, *Serratia marcescens* o de suspensiones de espermatozoides [103], [104], [105], [27], [53], [24]. En suspensiones de magnetos activos tambien han exhibido un comportamiento colectivo y de flujos caóticos [9].

En estos casos varios autores han implemetado un analisis de las cascadas de energía, mediante el calculo de los espectros de energía cinética, para caracterizar las escalas en las que se distribuye la energía cinética por unidad de longitud en la suspensión.

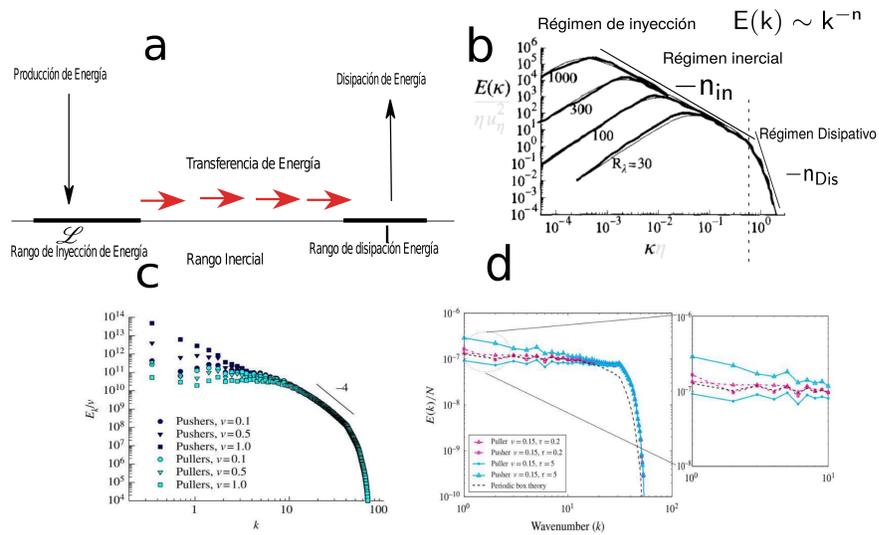


Figura 2-2: Esquema de una cascada de energía (a); Grafica de un espectro de energía cinética en función del numero de onda k (escala Log-Log) y el efecto del numero de Reynolds (b) observe que a medida que disminuye el Reynolds, el régimen inercial tiene un rango de k mas pequeño. Espectros de energía en suspensiones activas (c-d), en estos caso el régimen disipativo tiene una pendiente mas negativa, tomado de [106], [107], [48].

Una cascada de energía cinética se define como la distribución de la rata de energía cinética ($[L^3/T^3]$), que se transfiere o disipa entre estructuras de flujo de diferente tamaño L_0 , como vortices, comúnmente llamados *Eddies* [106], [50]. La energía cinética se distribuye o transfiere desde *Eddies* grandes hasta *Eddies* mas pequeños Figura 2-2 (a), los tamaños característicos donde se encuentran los *Eddies* se conocen como regímenes [106], [108], [109]. En turbulencia ($Re \gg 1$), se definen regímenes asociados a la transferencia de energía en tres intervalos, un régimen de inyección (*Eddies* grandes), un régimen inercial, donde se transfiere la energía, y un régimen disipativo, donde se disipa la energía por efectos viscosos (*Eddies* pequeños). La caracterización de la transferencia de energía cinética, se lleva a cabo

mediante el calculo de espectros de energía cinética en el espacio de Fourier (escala log-log) y en función de numeros de onda k , donde $k = 2\pi/L$ Figura **2-2**. Los valores de k se asocian con los tamaños característicos L_0 de los *Eddies* en cada régimen. En el espectro, cada régimen se caracteriza con una pendiente $\sim k^n$, y la diferencia entre el régimen inercial y disipativo es el valor de la pendiente n Figura **2-2** (b), claramente en un régimen disipativo el valor n sera mayor a un régimen inercial. Si el Reynolds tiende a ~ 0 , la pendiente del régimen disipativo sera mas negativa, debido a efectos viscosos.

Los campos de velocidad de suspensiones de partículas activas presentan estructuras de flujo caóticas, que indican que hay una transferencia o disipación de energía en forma similar a la que ocurre en turbulencia, y por lo tanto varios autores han propuesto utilizar cascadas de energía para caracterizar la energía disipada en distancias superiores al tamaño de los nadadores Figura **2-2** (c-d), [110], [9], [111], [112], [48].

Algunos autores han usado modelos de meso-turbulencia, para simular suspensiones activas concentradas, o mediante el calculo y analisis de espectros energía realizasos sobre los campos de velocidad [103], [62], [10], [104], [107], [9], [111], [48]. Tambien modelos de sistemas de particulas *particle disipation dynamics*, modelos hibridos en la mesoescala o continuos (Navier Stokes) han sido usados para explicar y emular la distribución de energía de las cascadas de energia de las suspensiones activas [110], [10], [9], [113], [62], [48].

En dinámica de fluidos es muy importante describir el comportamineto del fluido mediante funciones de au-tocorrelación, que se usan para conocer las distancias en las que un flujo conserva una estructura o dirección, es decir que tan correlacionado esta el flujo en terminos de una longitud [106], [108], [109]. Las longitudes mencionadas son llamadas longitudes de auto-correlación. En modelos y experimentos de suspensiones activas, las funciones de auto-correlación són muy utiles para cuantificar el efecto de la cantidad de nadadores sobre la velocidad del fluido [114], [112], [107], [115], [10], [21], [32], [116], [24], [86].

Quimiotaxis

La quimiotaxis es el movimineto que se presenta en sistemas biológicos de células eucariotas y procariotas, y sistemas sintéticos como partículas de Janus o catalizadores de platino [29], [2], [91]. En ambos sistemas este movimiento esta en fución de un perfil de concentraciones de una especie química. Las células bacterianas o catalizadores se mueven aleatoriamente en función de la concentración de la especie química, esta especie es conocida como sustancia quimioattractora, como lo es en en el caso de *E. coli* el Glutamato, Serina, Asparatato entre otros aminoacidos o Peroxido de hidrogeno en el caso de catalizadores de Platino [75], [29], [77], [117]. Cuando las células se mueven en dirección contraria al perfil de concentración, la sustancia se denomina como quimiorepelente, en el caso de cataliza-

dores activos. El movimiento de una bacteria o partícula activa debido a la quimiotaxis es similar al de un camino aleatorio. Pero este camino aleatorio se compone de dos situaciones, las cuales son **Run** y **Tumbling** Figura 2-3; en el *Run* la célula nada en una dirección aleatoria, esta dirección aleatoria es resultado del *Tumbling* en que todo el cuerpo celular rota [51], [75], [29], [77], [117], [118], [119].

La manera en que las células realizan un *Run* o *Tumbling* depende de la dirección de rotación del flajelo. Si el/los flagelos bacterianos rotan en sentido horario (CW) las células rotara es decir realiza un *Tumbling*, mientras que, si el o los flagelos bacterianos rotan en sentido antihorario (CCW) la células bacterianas se impulsaran hacia adelante realizando un *Run* [77], [29]. La elección del sentido de la rotación del flagelo obedece a una reacción de señalización bioquímica al interior del cuerpo celular [120], [121]. En células de *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis* o *Salmonella typhimurium* cada individuo realizó un censo temporal del gradiente de concentración de la sustancia quimioatrayente.

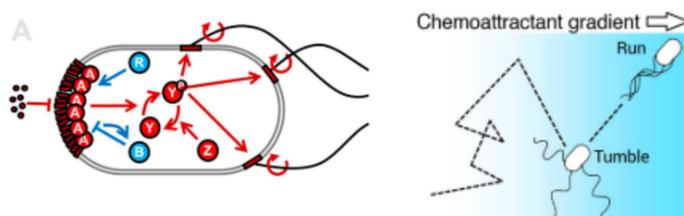


Figura 2-3: Proceso de quimiotaxis en *E. coli*.

El cambio entre las rotaciones del flagelo en direcciones CW y CCW se debe a la formación de un complejo receptor-ligando y las reacciones bioquímicas entre los receptores Che. Sin embargo el *Tumbling* o el *Run* de la célula en cada una de las situaciones se debe a un efecto puramente hidrodinámico que es consecuencia de las interacciones hidrodinámicas entre los flagelos $Re \sim 0$ [100], [122], [123].

Modelos para simular la quimiotaxis de partículas activas

Los modelos más usados para estudiar el comportamiento de células bacterianas, incorporan la concentración de la especie quimioatractora (o ligando), usando cinéticas de enzimas alostericas, cinéticas para simular señales en redes bioquímicas, cinéticas de ligando-receptor y trasducción de señales entre receptores proteínicos (modelado como un transductor) y un ligando (modelado como un actuador). Estos modelos se implementan en forma similar a lazos

de control predictivos sobre la rotación del flagelo [124], [125], [126], [121], [127]. Modelos de partículas autónomas y considerando modelos cinéticos de señalización en rutas metabólicas, basados en el uso de dinámica browniana (sin interacciones estéricas o de largo alcance) para las partículas han sido utilizados para el estudio de la quimiotaxis, auto-quimiotaxis para una sola célula o una suspensión de células bacterianas con campo de concentración de un escalar (ligando o sustancia quimioattractora) estacionario [128], [81], [129] [130], [131], [132], [131]. Modelos mesoscópicos que involucran las rutas de señalización, mediante sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias y la comunicación de una célula con una malla han sido desarrollados para estudiar la influencia de la auto-quimiotaxis y la señalización en el movimiento colectivo, sin considerar interacciones ni estéricas ni hidrodinámicas, el coeficiente de difusión del ligando fue de $D = 1,5 \times 10^{-14} \text{m}^2/\text{s}$ y evoluciona mediante la ecuación de transporte de Fick [133]. Modelos similares donde las partículas puntuales actúan como focos de consumo de sustrato y/o sustancia quimioattractora, para estudiar el efecto sobre una suspensión bacteriana y a formación de patrones complejos de densidad [134], [135], [121]. El efecto de la quimiotaxis o quimioquinesis sobre coloides activos (sin considerar efectos hidrodinámicos) hace que estos se agreguen o colapsen en solo agregado [136], [2].

Modelos de suspensiones de nadadores activos con y sin quimiotaxis

Keller y Segel [22], [124], [137] desarrollaron un modelo continuo no lineal difusivo, con base a la fenomenología de un proceso de quimiotaxis. En este modelo la cinética del término de reacción es similar a las de receptores de membrana, el flujo de densidad de biomasa es la suma de transporte difusivo y transporte direccionado. El transporte direccionado en las células se relaciona con un gradiente de concentración de una sustancia quimioattractora, la dirección de las células debido a un gradiente de concentración se controla con un parámetro de sensibilidad. Este modelo, muy aceptado a día de hoy, predice y emula los patrones y estructuras de colonias bacterianas donde la concentración de células es una variable continua, en presencia de un campo escalar de la sustancia quimioattractora [20].

Modelos similares de variable continua, asumiendo un sistema muy concentrado de nadadores, han sido implementados para estudiar la quimiotaxis, la gravitaxis y Oxitaxis de algas o células bacterianas en confinamiento y en presencia de sustancias quimioattractoras, el resultado fue el surgimiento de patrones de densidad de nadadores como plumas y de estructuras de flujo similares a inestabilidades de Rayleigh-Bénard [36], [138], [65], [139]. Los resultados de estos modelos fueron muy similares a los resultados experimentales en colonias de *B. subtilis* muy concentradas [140]. En estos casos la interacción con una superficie sólida es

clave para el surgimiento de dichas inestabilidades.

Modelos basados en teoría cinética de fluidos (Ecuaciones de Fokker-Plank o Smoluchowski), funcionales de densidad y *Mean Field Theory* también han sido utilizadas para modelar suspensiones concentradas, ya que permiten establecer con mayor rigor las posiciones y orientaciones de nadadores la inclusión de el efecto de un medio continuo disipativo mediante la ecuación de Stokes, asumiendo que la fuerza de la suspensión se deriva de un tensor de esfuerzos que genera la suspensión sobre el fluido. Y Finalmente permite realizar análisis de estabilidad lineal y encontrar parámetros del sistema en términos de las variables de entrada del mismo, y para los cuales el sistema es sensible y puede controlarse [80], [14], [94], [141], [110], [6] [4]. Un modelo interesante considera la quimiotaxis y el quorum sensing entre partículas, mediante la implementación de un modelo basado en *Mean Field Theory* [142] para un sistema de partículas confinadas. Otros modelos basados en teoría cinética, son los modelos que toman a las células como nemáticos activos, por lo que usan una formulación basada en el tensor de parámetros de orden y funcionales de energía libre, estos modelos permiten estudiar la turbulencia generada por una suspensión de nadadores así como también los defectos topológicos debido a la orientación de los nadadores [143], [5], [144]

Por otro lado modelos de suspensiones semidiluidas o dilutas han sido usados para estudiar en detalle las interacciones entre las partículas activas, y el surgimiento de la agregación de las mismas y de las fluctuaciones involucradas en la formación de estas estructuras. El modelo más básico es el modelo de Viseck, que consiste en partículas puntuales que tienen una fuerza constante y que interactúan mediante fuerzas conservativas (potenciales semiempíricos), haciendo uso de técnicas de dinámica molecular en cajas periódicas, *Multiparticle Collision Dynamics*, *Disipative Particle Dynamics*, [81], [145], [146], [147], [9], [87], [148], [47]. En suspensiones de partículas de Janus, debido al efecto de la reacción sobre la superficie de la misma, se suelen usar modelos basados en *Multiparticle Collision Dynamics*, *Disipative Particle Dynamics*, donde el solvente son partículas que no interactúan entre sí, pero sí con la partícula de Janus. Hunag, Robertosn y colaboradores [17], [149] desarrollaron un modelo de catalizadores de Janus Figura 2-4, en base a *Disipative Particle Dynamics* y mediante la función de distribución radial caracterizaron el efecto de agregación debido a la quimiotaxis de los catalizadores con el medio (H_2O_2). Para catalizadores activos o partículas de Janus, algunos modelos han implementado herramientas de dinámica browniana, teniendo en cuenta o no las interacciones hidrodinámicas [150], [87], [2], [151].

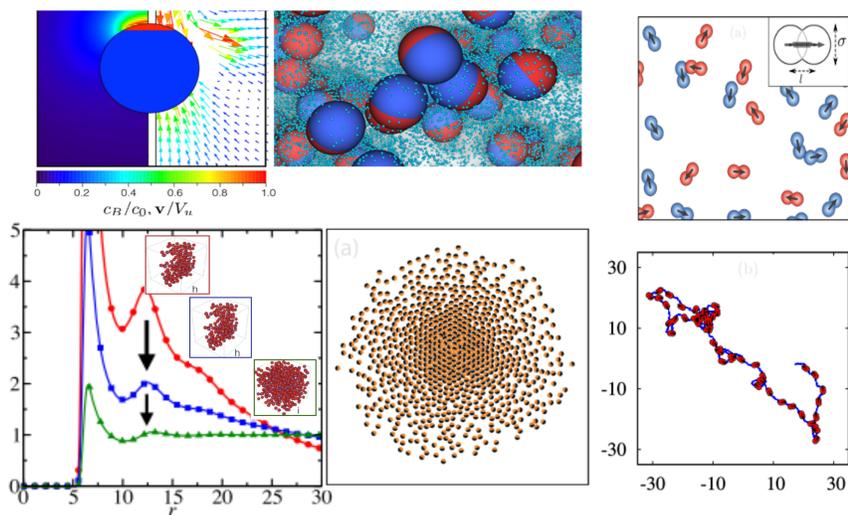


Figura 2-4: Ejemplos de modelos discretos basados en dinámica molecular y *Dissipative Particle Dynamics* de partículas de Janus. El perfil de velocidad de la partícula es similar al de un Puller. La función de distribución radial muestra el efecto de la quimiotaxis sobre la agregación de este tipo de sistemas.

Otros modelos, como el desarrollado por Lopus y colaboradores [74], permite analizar la dinámica de una suspensión de partículas autopropulsadas por medio de un modelo de Lattice Boltzmann, en un sistema periódico. El modelo predice la formación de agregados, sin embargo falla al aumentar la fracción volumétrica del sistema. La presencia de agregados se evaluó mediante una función de distribución radial, y encontraron que la hidrodinámica, es la responsable de atracción y alineación entre nadadores.

Los modelos particulados y la introducción de las interacciones hidrodinámicas entre los nadadores, implica resolver un problema de movilidad mediante el ensamble de una matriz de movilidad que contiene la información de las interacciones entre las partículas. La solución del problema de movilidad permite obtener los desplazamientos de cada uno de los nadadores debido a la presencia de los demás [52], [152]. Modelos más complejos como los derivados de la dinámica stokesiana han sido utilizados para evaluar el comportamiento de nadadores o partículas activas considerando las interacciones de corto alcance (lubricación) y de largo alcance, mediante el uso de la matriz de movilidad [153], [152], [154], [155], [35]. El uso de la matriz de movilidad implica un costo computacional alto, debido a que las operaciones son del orden de N^2 , donde N es el tamaño del sistema [49]. La dinámica Browniana o Stokesiana es muy usada para la simulación de nadadores modelados como un dipolo de fuerzas conocido como *Dumbbell*, dos puntos de fuerza unidos por una ligadura rígida [92], [156], [157].

Otros modelos de nadadores activos como los de Romanczuk y colaboradores demostraron que la quimiotaxis puede influir en la dinámica del sistema, formando agregados que tienden a moverse en forma circular [158], [159], [152].

Ramía y colaboradores [160] desarrollaron un modelo muy detallado, teniendo en cuenta la geometría celular incluyendo el flagelo, donde las interacciones hidrodinámicas entre otras bacterias o superficies influían en las trayectorias de nado y patrones de flujo de la bacteria, la *Teoría de Cuerpo Alargado* (Slender Body theory) usada permite estudiar a detalle los patrones de flujo generados por cuerpos alargados, aproximando el objeto como una distribución de puntos (Stokeslet); esta teoría es muy usada en análisis de flujo generados por flagelos, cilios, filamentos etc, [161], [155], [55]. Debido a que, con este modelo cada nadador es la suma de puntos de fuerza, este método es impráctico para el estudio de suspensiones que involucran muchas partículas activas.

Modelos mesoscopicos involucran la interacción de un sistema discreto con uno continuo, este enfoque une las dos escalas características mediante una rigurosidad en la física de las interacciones. Estos modelos han sido desarrollados y utilizados recientemente para capturar las interacciones hidrodinámicas de sistemas dilutos, semidiluidos y concentrados. Hernandez y colaboradores desarrollaron un modelo muy simple de partículas activas compuestas por un dipolo de fuerzas Figura 2-5(a). Modelos similares, como el introducido por Decoene y Martins [162], han sido propuestos en 2D para estudiar el movimiento colectivo de nadadores que imprimen una fuerza constante en el fluido Figura 2-5 (b). Un modelo simple desarrollado por Fauci y colaboradores [163] [164], [61] basado en *Slender body theory* (emular cuerpos alargados como distribución de puntos fuerza sobre el fluido), captura la evolución del flujo de fluido debido al nado y a las interacciones hidrodinámicas entre partículas activas (bacterias), demostrando que la hidrodinámica influencia el alineamiento entre nadadores. Underhill y colaboradores [34], [165] en base a resultados previos desarrollaron un modelo de suspensiones activas confinadas, y encontraron que la dinámica de estas se correlaciona con la fracción volumétrica de la suspensión Figura 2-5(c). Saintillan y Shelly [107] desarrollaron un modelo de suspensiones activas para filamentos alargados, usando *Slender body theory*, encuentro que flujos caóticos de largo alcance relacionados con el tamaño del sistema. Estos flujos pueden mezclar un escalar pasivo cuando aumenta la concentración del sistema Figura 2-5(d). Nuevamente [13] aplico el modelo de nadadores, en un dominio confinado imponiendo un gradiente de concentración estacionario. Los nadadores interactuaron con la información del gradiente de concentración, los nadadores se agregaron hacia la dirección del gradiente de concentración Figura 2-5. Un modelo más elaborado introducido por Dillon [61] incluye la quimiotaxis para un ensamble de partículas activas, mediante las distribuciones de Poisson para determinar las probabilidades de *Run* y *Tumbling*, en las que las medias estaban relacionadas con la concentración cercana a los nadadores, este modelo reproduce las trajec-

torias de camino aleatorio que recorren las bacterias. Otros modelos interesantes, basados en la metodología de Fauci fue desarrollado por Xu [166] Figura 2-5(f), este modelo utiliza las cinéticas de ligando receptor, sin embargo solo puede simular concentraciones dilutas de suspensiones activas.

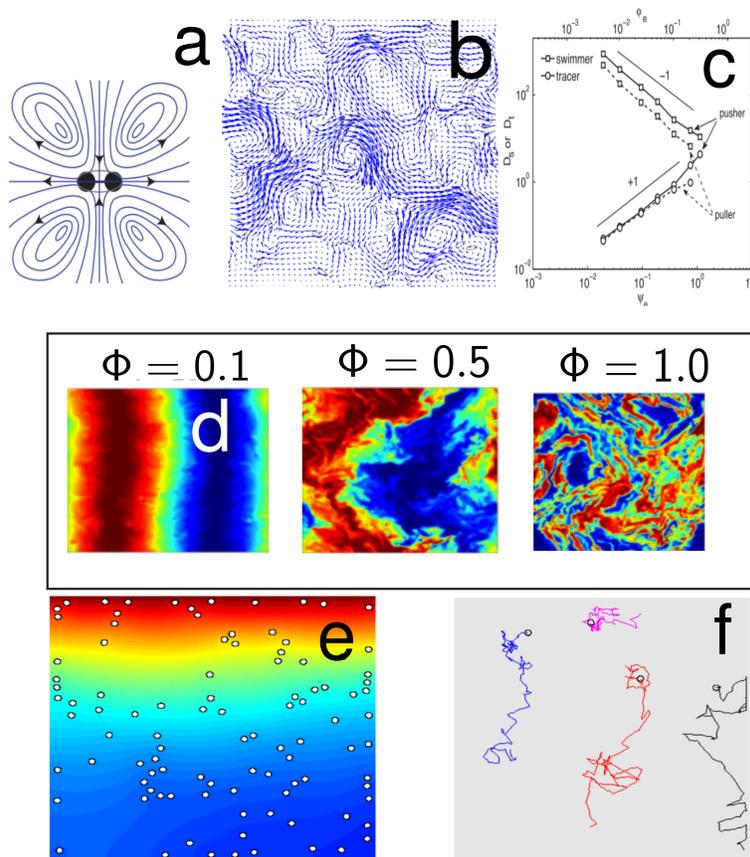


Figura 2-5: Modelos en la meso-escala para nadadores (a) modelo de un dumbbell representando a un *Pusher* (b) Campo de velocidades generado por varios nadadores en el medio (c) Variación de la difusividad de nadadores y trazadores en la suspensión (d) evolución de una sustancia escalar en una suspensión de *Pushers* en varias concentraciones de nadadores (e) quimiotaxis para una suspensión de nadadores, teniendo en cuenta el transporte convectivo (f) trayectorias del movimiento de nadadores en presencia de un campo de una sustancia quimioatrayente.

El modelo es confinado en un canal periódico, sin embargo no tiene en cuenta las interacciones de corto alcance y estéricas entre bacterias, además de limitarse a simular suspensiones muy diluidas. Modelos similares, con o sin quimiotaxis (introducida como pro-

babilidades donde la media dependia del gradiente de concentración de un escalar como el O_2), han sido desarrollados para simular suspensiones bajo un confinamiento total o parcial y demuestran que la hidrodinamica induce a los nadadores a concentrarse en las paredes [166], [13], [86], [167], [107], [112], [34], [48], [27], [53].

Hernandez y colaboradores [31] desarrollaron un método que encuentra las funciones de Green para modelos mesoscopicos confinados, mediante el uso eficiente de sumas de Ewald y metodos PPPM (partícula-partícula-partícula-malla); Este método es muy eficiente para calcular las interacciones hidrodinamicas de suspensiones de polímeros, entre otros, conocido como GgEm, este método permite capturar la evolución y las interacciones de corto y largo alcance de tipo electrostático, hidrodinámico o magnético. Y [32] usaron GgEm para simular suspensiones confinadas entre dos paredes. GgEm, permite hacer simulaciones muy eficientes en la mesoescala y en sistemas semidiluidos. Para suspensiones de partículas autopropulsadas [31], [34], [116] implementaron GgEM prediciendo el comportamiento de nadadores, modelados como *Dumbells* cerca de las superficies sólidas de un canal, así como la diferencia de difusividades entre pullers y pushers [168], [169].

Este trabajo se estudió la dinámica de una suspensión de nadadores con quimiotaxis hacia una sustancia quimioattractora (campo escalar), el sistema esta confinado en un canal Periódico. Para esto se construyo un modelo en la mesoescala, done los nadadores (parte discreta) fueron modelados como un dipolo de fuerzas, o *Dumbells*, y el fluido y el escalar (parte continua) fueron modelados por medio de una ecuación de Stokes y de difusion-convección. La parte discreta se resolvió con tecnicas de dinámica molecular acopladas con la solución de la parte continua (fluido y escalar) resulta mediante técnicas de discretización sobre una malla. La implementación de la quimiotaxis, debido a la complejidad en el proceso de transducción de señales químicas de ligando receptor, se reemplazo por un modelo mínimo de quimiotaxis. El modelo fue un actuador *On – Off*, que se prende o apaga en función de la concentración del escalar (sustancia quimioattractora) en un punto cercano al centro de masa de cada *Dumbell*. El encendido o apagado determina si el nadador realiza un *Tumbling* (rotacion sobre su centro de masa) o sí realiza un *Run*.

La simplificación de la quimiotaxis se hizo con el fin de estudiar el impacto físico del *Run* y *Tumbling* sobre la suspensión, y el movimiento colectivo generado en un sistema confinado. Tambien se simulo un modelo para una suspension de nadadores, con una probabilidad de *Run – Tumbling* por nadador, cuyo movimiento esta determinado por un arbol de desiciones. La solución del sistema se realizo con el metodo llamado GgEm [31], [34], [116], [32]. Los modos de nado modelados y simulados en este trabajo, para las suspensiones fueron;

- Modo de nado Activo: sin quimiotaxis

- Modo de nado Interactuante: con Quimiotaxis, modelo *On – Off*
- Modo de nado Probabilidad Impuesta: sin quimotaxis

La motivación de este trabajo, es el de utilizar un modelo mínimo para suspensiones activas con quimiotaxis, sin implementar un método probabilístico para la quimiotaxis como si lo hicieron [48], [170], [56], [129], [171], [172], [173]. Por otro lado a diferencia de modelos particulados, que incorporan modelos robustos de quimiotaxis, aquí se incorporó el flujo generado por cada nadador y el impacto de este flujo sobre la sustancia el escalar (Ligando), que retroactivamente modifica la quimiotaxis [121], [127], [131], [132]. Aunque ya hay algunos modelos similares [166], [61], estos no logran generar movimientos colectivos por la baja concentración de nadadores en el medio, debido a que los modelos usados son ineficientes computacionalmente. El modelo expuesto aquí logra incorporar una cantidad mucho mayor de nadadores, la suficiente para generar movimientos colectivos, debido a la hidrodinámica y a la quimiotaxis.

Capítulo 3

Marco de Referencia-Hidrodinamica de suspensiones activas

Hidrodinámica de suspensiones de partículas a bajos números de Re

Una partícula activa de un radio a , del orden de micras (μm), que se mueve en un fluido con una velocidad constante $\|\mathbf{v}'\|$ del orden ($\mu m/seg$), aplicando una fuerza constante \mathbf{f} sobre el fluido produce una perturbacion instantanea en el mismo y genera un campo de velocidades. El flujo se describe por medio de la ecuación de Navier-Stokes:

$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \mu \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \nabla P(\mathbf{x}) - \mathbf{F}$. El numero de Reynolds, para la partícula es $Re = a\|\mathbf{v}'\|\rho/\mu$. En un medio como el agua, el valor del Reynolds $Re = \sim 0$, lo que implica que el sistema es quasi-libre de inercia y que las fuerzas viscosas del fluido superan a las fuerzas inerciales de la partícula. Debido a que $Re \sim 0$ la parte izquierda de la ecuación de Navier-Stokes desaparece, dando lugar a la ecuacion de Stokes: $\mu \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \nabla P(\mathbf{x}) - \mathbf{F}$ [49], [52], [50], [38].

La reversibilidad que impone la ecuación de Stokes hace que las perturbaciones sean instantaneas y de un orden de $O(r^{-1})$, por lo tanto de largo alcance. Una interacción de largo alcance es aquella que decae más lento que r^d , donde d es la dimensionalidad del sistema [49]. Una aproximación de modelo mínimo es considerar a las partículas como puntos de fuerza, debido a que la longitud de la interacción es mayor al tamaño de la partícula, descartando los efectos de lubricación [52], [38], [39]. Por la aproximación anterior la fuerza de una partícula puntal, ubicada en \mathbf{x}_0 , puede escribirse como: $\mathbf{F} = \mathbf{f}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, donde \mathbf{f} es la fuerza que ejerce una partícula puntal sobre el fluido y $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ es la función delta de dirac [49], [52], [21], [59], [174]. Como la partícula no tiene inercia, su velocidad es constante y la posición se obtiene a partir del balance de fuerzas: $\mathbf{f} + \mathbf{f}^{drag} = \mathbf{0}$, donde $\mathbf{f}^{drag} = -\zeta\mathbf{v}'$ es

la fuerza de arrastre.

El flujo en el punto \mathbf{x} generado por la presencia de una partícula puntual ubicada en \mathbf{x}_0 , en un dominio infinito, se obtiene mediante la ecuación de Stokes para un punto de fuerza (partícula puntual), ecuación 3.1:

$$\begin{aligned}\mu \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \nabla P(\mathbf{x}) &= -\mathbf{f} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \\ \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= 0\end{aligned}\tag{3.1}$$

$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ cuando $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{0}$. La solución de la ecuación 3.1, obtenida mediante transformadas de Fourier o funciones armónicas o su función de Green asociada es ecuación 3.2 :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{G}^{\text{OB}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{f}.\tag{3.2}$$

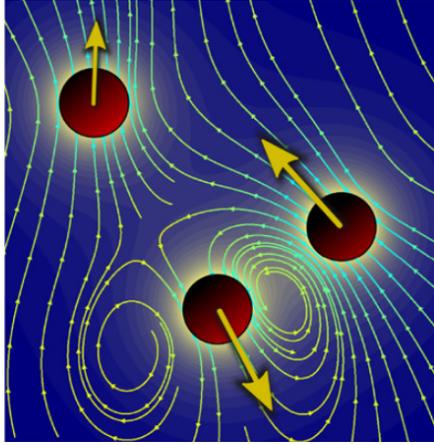


Figura 3-1: Líneas de corriente de interacciones hidrodinámicas, entre partículas puntuales.

Llamada solución fundamental. Donde $\mathbf{G}^{\text{OB}}(\mathbf{x})$ es la función de Green asociada a la ecuación 3.1 y se conoce como Stokeslet o Tensor de Ossen-Burgers (OB) para en un dominio infinito, ecuación 3.3:

$$\mathbf{G}^{\text{OB}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \frac{1}{8\pi\mu} \left(\frac{\boldsymbol{\delta}}{r} + \frac{\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}}{r^3} \right)\tag{3.3}$$

Donde $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|$ y $\boldsymbol{\delta}$ es el tensor delta de kronecker o tensor identidad, una forma alternativa de escribir la ecuación 3.3 es mediante funciones armónicas como

$\mathbf{G}^{\text{OB}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = -(\delta\nabla^2 - \nabla \otimes \nabla) \mathbf{H}(\mathbf{r})$. Donde $\mathbf{H}(\mathbf{r}) \sim r/(8\pi\mu)$ es una funcion armonica de orden $\mathcal{O}(r)$ [175], [49], [52], [21], [59], [174].

La velocidad del fluido, generado por la particula, es instantanea de orden $\mathcal{O}(r^{-1})$, decae mas lento que $\mathcal{O}(r^{-3})$. Una partícula activa en una suspension, se mueve a traves del fluido de forma que la la fuerza de arrastre que experimenta la partícula es $\mathbf{f}^{\text{drag}} = -\zeta\mathbf{v}'_i$. Donde $\zeta = 6\pi\mu a$ es el coeficiente de fricción o arrastre del fluido sobre la partícula. En una suspensión la velocidad del fluido generado por una partícula puntual afectan la velocidad y posición de las demas partículas puntuales Figura **3-1**. Lo anterior se conoce como interacción hidrodinámica, la velocidad del fluido generado por una partícula, ecuación 3.1 es lineal, y se puede aplicar el principio de superposición [50], [96], [52], [38]. De esta forma la velocidad de un punto de fuerza i en presencia de otros puntos en la suspension es:

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{x}_i) = \mathbf{v}'_i + \mathbf{u}_i(\mathbf{x}_i) \quad (3.4)$$

La velocidad del fluido $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i)$ en la posición de la partícula i es la perturbación debido a la presencia de una partícula $j \neq i$ en la suspension. Entonces para una suspension de N partículas que actuan como puntos de fuerza, el flujo generado por las partículas se describe mediante:

$$\mu\nabla^2\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \nabla P(\mathbf{x}) = -\sum_i^N \mathbf{f}_i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (3.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0$$

En sistemas periodicos de tamaño L^3 , donde también es valida la ecuación 3.2, una aproximación util es que las partículas esten muy separadas, esto es, para una fracción volumetrica ($\Phi = 4\pi a^3 N/3/L^3$) diluta $\Phi < 0,1$ la solución de la ecuación 3.5 es:

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{x}_i) = \frac{\mathbf{f}_i}{6\pi\mu a} + \sum_{i \neq j}^N \mathbf{G}_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \mathbf{f}_j \quad (3.6)$$

Donde $\mathbf{G}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ es el tensor asociado a las interacciones hidrodinámicas y se define como:

$$\mathbf{G}_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = (1 - \delta_{ij}) \mathbf{G}^{\text{OB}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$$

De esta manera, la velocidad de cada partícula esta determinada por la fuerza de arrastre que experimenta y por las perturbaciones de las demas partículas en el fluido. Generalizando la expresion de la ecuación 3.6, para una suspensión de N partículas, el sistema se puede generalizar en forma matricial, donde las velocidades y fuerzas de las partículas estan contenidas en los terminos $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N]$ y $\mathbf{F} = [\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_N]$. La ecuación que describe la velocidad de todo el sistema es [175], [49], [52], [21], [59], [174], [38], [50]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \dots \\ \mathbf{v}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\delta}{6\pi\mu a} & \mathbf{G}_{12}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) & \dots & \mathbf{G}_{1N}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_N) \\ \mathbf{G}_{21}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) & \frac{\delta}{6\pi\mu a} & \dots & \mathbf{G}_{2N}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{G}_{N1}(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_1) & \mathbf{G}_{N2}(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_2) & \dots & \frac{\delta}{6\pi\mu a} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ \dots \\ \mathbf{f}_N \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

En una forma compacta (3.7) se convierte en:

$$\mathbf{V}(\mathbf{R}) = \mathbf{M} \cdot \mathbf{F} \quad (3.8)$$

Donde $\mathbf{R} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N]$ es el vector de posicion para cada punto de fuerza y en la ecuación 3.8 se conoce como problema de movilidad y \mathbf{M} se conoce como la **Matriz de Movilidad**, definida como:

$$\mathbf{M}_{ij} = \frac{\delta}{6\pi\mu a} + \sum_{i \neq j}^N \mathbf{G}_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (3.9)$$

La Movilidad para cualquier sistema de partículas activas sometido a interacciones hidrodinamicas, se relaciona con la matriz \mathbf{M} de la forma:

$(\langle \mathbf{x}(t) - \langle \mathbf{x}(t) \rangle \rangle \langle \mathbf{x}(t) - \langle \mathbf{x}(t) \rangle \rangle) \sim \mathbf{M}t^n$. Cuando una partícula, browniana o no, se mueve en un medio viscoso hay una disipación de energía cinetica en forma de calor y esto afecta su movimiento, por lo que \mathbf{M} debe ser simetrica, definida positiva $\mathbf{F} \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{F} > 0$ y cumplir la condición de incompresibilidad $\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \mathbf{x}_i} = 0$ [85], [83], [49]. En el caso de suspensiones en regimen semidiluto $0,1 \leq \Phi < 0,3$ o densas $\Phi \geq 0,3$ no se cumple las condiciones anteriores, debido a la singularidad $1/r$ presente en $\mathbf{G}_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, también sobreestima las velocidades de las partículas, no considera las reflexiones del flujo de fluido de una partícula hacia las demas,

y por lo tanto genera la superposición del centro de una partícula con otra [49], [174], [59]. Para evitar el problema del incumplimiento de las condiciones de la matriz de movilidad, se incorporan correcciones al Tensor $\mathbf{G}_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$. Para esto se usa una regularización del tensor de la ecuación 3.3. Una regularización es el reemplazo de la función delta de dirac en la ecuación 3.1 por una función suave.

Una alternativa muy comun es el tensor Rote-Prager-Yamukawa, ecuación 3.9:

$$\mathbf{G}_{ij}^{\text{RPY}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{1}{\zeta} \left[\frac{3a}{4} \left(\frac{\delta}{r} + \frac{\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}}{r^3} \right) + \frac{a^3}{2} \left(\frac{\delta}{r^3} - \frac{3\mathbf{x} \otimes \mathbf{x}}{r^5} \right) \right] \quad (3.10)$$

Una forma alternativa de escribir el tensor de Rotne-Prager-Yamukawa (RPY) es:

$$\mathbf{G}_{ij}^{\text{RPY}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \left(\frac{3a}{4} + \frac{a^2}{4} \nabla^2 \right) (\delta \nabla^2 - \nabla \otimes \nabla) (\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|) \quad (3.11)$$

Observe que el tensor correguido puede escribirse como:

$\mathbf{G}_{ij}^{\text{RPY}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \mathbf{G}_{ij}^{\text{OB}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) - \mathbf{G}_{ij}^r(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, donde $\mathbf{G}_{ij}^r(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ es el tensor de Ossen-burgers regularizado.

El tensor de movilidad se rescribe como:

$$\mathbf{M}_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{\delta}{6\pi\mu a} + \sum_{i \neq j}^N (1 - \delta_{ij}) \mathbf{G}_{ij}^{\text{RPY}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (3.12)$$

La implementación de una forma de regularizada del tensor de Ossen-Burgers respeta las condiciones impuestas a la matriz de movilidad elimiando las singularidades, sin embargo las desventajas de $\mathbf{G}_{ij}^{\text{RPY}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ es el ensamble de la matriz de movilidad, el cual es un proceso muy lento computacionalmente, en especial por el calculo de las interacciones $1/r$ y $1/r^3$ para N puntos de fuerza. Las interacciones de largo alcance requieren el calculo de las contribuciones de todas las partículas lo que hace que la operacion sea costosa para N puntos de fuerza generando operaciones de orden $O(N^2)$. Para evitar el calculo de operaciones de orden $O(N^2)$, se puede implementar unas sumas de las interacciones sobre un dominio periodico repetido n veces, las sumas contienen terminos que calculan de forma independiente las interacciones de largo y corto alcance, reduciendo el costo a un orden $O(N)$, este proceso se conoce como **Sumas de Ewald** y depende de los terminos de cada suma [49], [176], [31].

Sumas de Ewald Para Stokeslets

Para un dominio \mathcal{R}^3 , de tamaño L , que se repite n veces la ecuación 3.6 se escribe como:

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{x}_i) = \sum_{\mathbf{n}} \left(\frac{\boldsymbol{\delta}}{6\pi\mathbf{a}\mu} \cdot \mathbf{f}_i + \sum_{j=1}^N (1 - \delta_{ij}) \mathbf{G}_{ij}^{\text{OB}}(\mathbf{r}_{ji} - \mathbf{x}_n) \cdot \mathbf{f}_j \right) \quad (3.13)$$

donde $\mathbf{x}_n = (n_x L, n_y L, n_z L)$, donde $n_x, n_y, n_z \in \mathcal{Z}^3$, y $\mathbf{r}_{ji} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$. La velocidad del fluido decae en un orden (r^{-1}) y el calculo de la ecuación 3.13 es lento. Las Sumas de Ewald consiste en descomponer terminos que contienen singularidades, de la ecuación 3.13, en terminos de funciones suaves, lo que resulta en en dos Sumas. Una suma contiene las interacciones de largo alcance (Para todo el dominio de tamaño L^3), que son calculadas en el espacio de Fourier (\mathbf{k}), y la otra suma contiene las interacciones de largo alcance restringidas entre los puntos de fuerza vecinos e imagenes periodicas mas cercanas (a distancias menores o iguales a $0,5L$). Las funciones suaves dependen de un coeficiente α que controla la convergencia del calculo de los terminos r^{-1} y de \mathbf{k}^{-1} en un orden $O(N \log N)$ [122], [177], [176]. La metodología es la siguiente: El termino $\mathbf{f}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, de la ecuación 3.1, se descompone de la siguiente forma [83], [178]:

$$\mathbf{f}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) = \mathbf{f}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) - \mathbf{f}\mathbf{g}(\alpha\mathbf{r}) + \mathbf{f}\mathbf{g}(\alpha\mathbf{r}) \quad (3.14)$$

Donde la función $\mathbf{g}(\alpha\mathbf{r})$ debe satisfacer la condición $\int \mathbf{g}(\alpha\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \mathbf{1}$, siendo $\mathbf{r} = \|\mathbf{r}_{ji}\|$. El termino que contiene la singularidad $\mathbf{f}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) - \mathbf{f}\mathbf{g}(\alpha, \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n)$ Se resuelve en el espacio real, y el termino que solo contiene la función suave $\mathbf{f}\mathbf{g}(\alpha, \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n)$ se resuelve en el espacio reciproco.

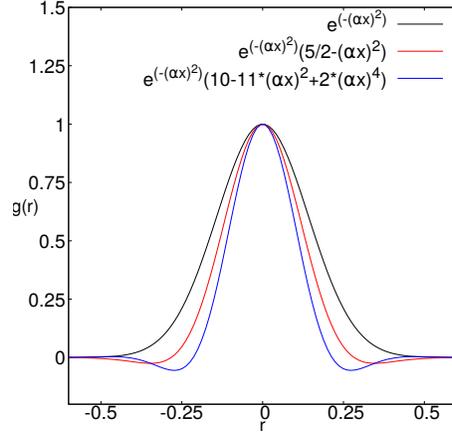


Figura 3-2: Ejemplos de funciones $g(r)$ usadas en sumas de Ewald para Stokeslet [179], [180], [181].

La función de Green resultante se escribe como:

$$\mathbf{G}_{ij}^{\text{OB}}(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n, \alpha) = \mathbf{G}_{ij}^{(l)}(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n, \alpha) + \mathbf{G}_{ij}^{(g)}(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n, \alpha).$$

El primer termino contiene la solución en el espacio real (de forma analítica) y el segundo se soluciona en el espacio de Fourier. Tomando la función de Green a la ecuación 3.3 y su forma alternativa (mediante armónicos esféricos), las funciones locales y globales son:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{ij}^{(l)}(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n, \alpha) &= \mathbf{G}_{ij}^{\text{OB}}(\mathbf{r}_{ij}) - (\mathbf{G}_{ij}^{\text{OB}} * \mathbf{g})(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n, \alpha) = (\nabla^2 \boldsymbol{\delta} - \nabla \otimes \nabla)(\Theta(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n)) \\ \mathbf{G}_{ij}^{(g)}(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n, \alpha) &= (\mathbf{G}_{ij}^{\text{OB}} * \mathbf{g})(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n, \alpha) = (\nabla^2 \boldsymbol{\delta} - \nabla \otimes \nabla)(\Xi(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n)) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Donde $\Theta(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n) = \text{H}(r) - \Xi(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n)$ y $\Xi(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n)$ son funciones armónicas. $\Xi(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n)$ es una función suave. Note que: $\text{H}(r) = \Theta(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n) + \Xi(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n)$.

El término $\mathbf{G}_{ij}^{(g)}(\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{x}_n, \alpha)$ se escribe como:

$$\hat{\mathbf{G}}_{ij}^{(g)}(\mathbf{k}, \alpha) = -\hat{\mathbf{G}}_{ij}(\mathbf{k}, \alpha) \frac{\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k}, \alpha)}{k^4} = \left(\frac{\boldsymbol{\delta}}{k^2} - \frac{\mathbf{k} \otimes \mathbf{k}}{k^4} \right) \hat{\Xi}(\mathbf{k}, \alpha) \quad (3.16)$$

Donde $\mathbf{k} \in \mathcal{K}^3 = \left\{ \frac{2\pi \mathbf{i}}{L} : \mathbf{i} \in \mathcal{Z}^3 \right\}$. De acuerdo con la ecuación 3.15, las funciones de Green se asocian a velocidades de corto $\mathbf{v}^l(\mathbf{x})$ y largo alcance $\mathbf{v}^g(\mathbf{x})$. Finalmente la ecuación 3.12 se escribe como:

$$\sum_{\mathbf{n}} \mathbf{G}_{ij}((\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) - \mathbf{x}_n, \alpha) = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\delta}{6\pi\mu a} + \sum_{\mathbf{n}} \left(\sum_{j=1} (1 - \delta_{ij}) \left[\mathbf{G}_{ij}^{(l)}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_n, \alpha) + \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{\mathbf{G}}_{ij}^{(g)}(\mathbf{k}, \alpha) \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_n)) \right] \right) \quad (3.17)$$

Recientemente se han desarrollado metodos para acelerar el calculo y converjencia de Sumas de Ewald usando metodos espectrales como la transformada rapida de Fourier (FFT) para calcular la contribucion global, estos metodos se conocen como metodos de Ewald acelerados [180], [176], [31] [84], [182], [183], [49]. Por todo la anterior la descomposici3n de una funcion de Green mediante sumas de Ewald, la velocidad de una part3cula en un fluido, por medio de la ecuaci3n 3.4 y 3.17 se puede describir en terminos de las velocidades como:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^{\text{local}}(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^{\text{global}}(\mathbf{x}) \quad (3.18)$$

Donde $\mathbf{v}^{\text{global}}(\mathbf{x}) = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \hat{\mathbf{v}}_{\text{global}}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$.

Mientras que $\mathbf{v}^{\text{local}}(\mathbf{x}) = \left(\frac{\delta}{6\pi\mu a} + \mathbf{G}^{(l)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \right) \cdot (\mathbf{f}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) - \mathbf{f}g(\alpha\mathbf{r}))$.

Uno de los m3todos para el calculo de Stokeslet mediante sumas de Ewald citado, es llamado GgEm (Geometry Ewald like method) que es muy eficiente ya que permite encontrar la expresi3n 3.18, mediante sumas de Ewald aceleradas y Stokeslet regularizados. Como el termino de velocidad global se calculo en el espacio de Fourier para todo el espacio real, este termino se puede obtener mediante la soluci3n de la ecuaci3n 3.1, con $\mathbf{f}_{\text{global}} = \mathbf{f}g(\alpha\mathbf{r})$ como una densidad de dipolos de fuerza. La soluci3n del termino de velocidad local se puede obtener de forma analitica usando, $\mathbf{f}_{\text{local}} = \mathbf{f}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) - \mathbf{f}g(\alpha\mathbf{r})$. Ya que solo tiene encuesta distancias menores a la mitad del dominio. La regularizaci3n que se menciona en la secci3n anterior puede realizarse usando la ecuaci3n 3.13 o usando una funci3n de regularizaci3n [181], [180], [184], [185]

Efecto de las superficies solidas

Como muchas aplicaciones en suspensiones activas y materia blanda, requieren que los sistemas esten confinados entre superficies solidas, el efecto de las paredes deben ser considerados en los modelos de suspensiones activas [4], [186], [187], [139], [188]. Cerca de una superficie solida una part3cula, en una suspensi3n, puede experimentar un flujo reflejado por la pared

debido a si misma y/o las demas particulas. La velocidad de una partícula confinada entre superficies solidas, se puede representar mediante una función de Green $\mathbf{G}_w(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_w)$, y que decae a medida que nadador se aleja de la pared. Utilizando el principio de superposición el efecto de superficies solidas se puede incluir en la ecuación 3.9:

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{x}_i) = \left(\frac{\delta}{6\pi\mu a} + \mathbf{G}_w(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_w) \right) \cdot \mathbf{f}_i + \sum_{i \neq j}^N (\mathbf{G}_w(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \mathbf{G}_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) \cdot \mathbf{f}_j \quad (3.19)$$

El reflejo de la pared es una imagen de la partícula que actua sobre si misma a una distandia d . El efecto de las paredes se puede capturar usando el método de las imágenes, sin embargo su implementación sobre puntos de fuerza cercanos a la pared no cancela los flujos en la pared, y tiene un costo computacional alto al trabajar con singularidades [189]. Esto se puede corregir mediante el uso de metodos de regularización que cancelan el fluido de las imagenes en las paredes, mediante Stokeslet Regularizados, a sido usado en sistemas como suspensiones brownianas, flagelos y cilios [184], [166], [190], [191], [122], [192]. El GgEm, fue desarrollado para calcular las interacciones de una suspensión confinada, mediante Stokeslet-Regularizados, en forma rapida y eficiente ademas puede ser aplicado a soluciones poliméricas, electrolíticas, de particulas brownianas, globulos rojos, entre otros [31], [89], [185].

Capítulo 4

Metodología y Diseño de Experimentos

Modelo Mínimo para un nadador

Cada nadador fue modelado como un dipolo de puntos de fuerza, cada punto de fuerza representa un bead de radio a . El tamaño del dipolo fue de $l = 3a$. El dipolo se mantiene unido por un resorte no lineal cuya longitud natural es l Figura 4-1. Las dimensiones del nadador, para la aplicación de volumen excluido, tomando en cuenta los beads, fue $l_{\text{dumb}} = 5a$ de largo y $\sigma = 2a$ de ancho.

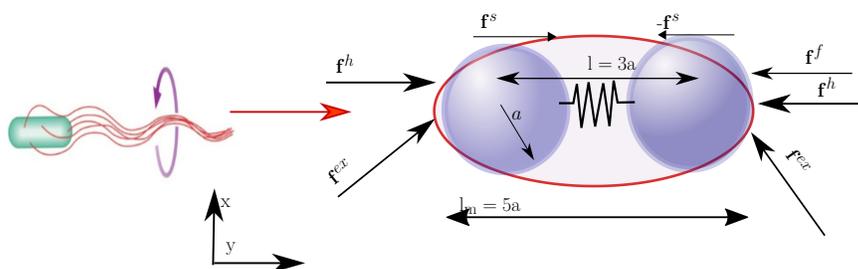


Figura 4-1: Modelo mínimo de nadador (dumbbell), formado por dos dipolos de fuerza ubicados en el centro de los beads de radio a , unidos por un resorte, sobre cada punto del dipolo actúan fuerzas externas y de arrastre. La línea roja detalla la forma del nadador para la aplicación del potencial de Gay-Berne

Los nadadores están confinados en un canal que es periódico en la dirección x, y de largo L y confinado por dos paredes en la dirección z , de altura H Figura 4-3 .

El canal tiene las direcciones $x_1(x)$, $x_2(y)$ y con una misma longitud $L_x = L_y = L$. Tanto L como H , estan escalados con el largo del dipolo (o del nadador) $l = 3a$ y el radio de cada bead del nadador $l = 3a$. $H = \text{conf} * l$ y $L = P * H$, los parametros conf y P son el confinamiento del canal y el periodo de cada una de las direcciones x, y del canal.

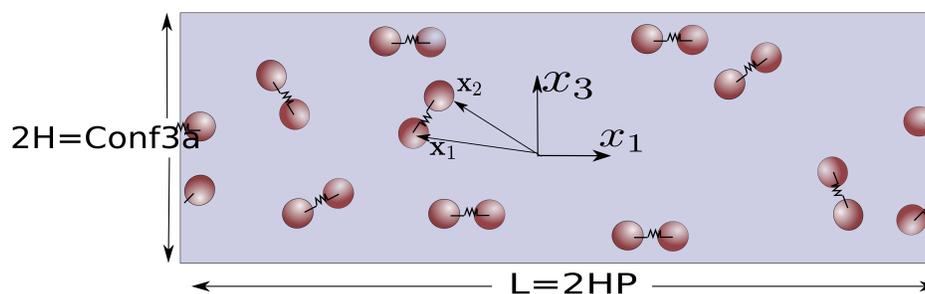


Figura 4-2: Sistema a simular, suspensi3n de nadadores en un canal peri3dico en las direcciones x_1 y x_2 (x y y) y confinado por dos paredes rıgidas en x_3 (z). Los dos vectores posici3n \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 , sealan las posiciones de la cabeza y cola del nadador desde el centro de coordenadas. La longitud L y alto H del canal dependen del largo $l = 3a$ de cada nadador, del confinamiento y del periodo P del canal.

Las velocidades, tiempos y longitudes caraterısticas de cada nadador son:

Velocidad $V_{\text{dumb}} = 10 \times 10^{-6} \text{m/seg}$, el radio de cada bead es $a = 0,2 \times 10^{-6} \text{m}$, el largo del nadador es $l_{\text{dumb}} = 1 \times 10^{-6} \text{m}$, estos parametros fueron tomados celulas de *E. coli* [73], [86], [73], [72]. El largo del dipolo es $l = 0,6 \times 10^{-6} \text{m}$. Cada dipolo tiene una fuerza constante que actua sobre uno de sus puntos, esta fuerza propulsa al nadador y actua como torque para la rotaci3n del mismo. El tiempo de nado del nadador fue $\delta t_{\text{dumb}} = \frac{5a}{V_{\text{dumb}}}$, el tiempo de nado de cada bead fue $\delta t_a = \frac{a}{V_{\text{dumb}}}$.

Balace de Fuerzas

En un fluido newtoniano como el agua y debido al tamano del nadador, el movimiento del nadador es libre de inercial $\text{Re} \sim 0$. Asi el balace de fuerzas sobre un bead i de un nadador j es:

$$\mathbf{f}_i^{j,h} + \mathbf{f}_i^{j,\text{ext}} + \mathbf{f}_i^{j,S} + \delta_{i2} \mathbf{f}_i^{j,\text{fl}} = \mathbf{0} \quad (4.1)$$

Donde $\mathbf{f}_i^{j,h}$ es la fuerza de arrastre (hidrodinamica), $\mathbf{f}_i^{j,\text{ex}}$ es la fuerza de volumen excluido,

$\mathbf{f}_i^{j,\text{Spring}}$ es la fuerza del resorte rigido, $\mathbf{f}_i^{j,f}$ fuerza del flagelo que actua solo sobre una de los dos beads.

Fuerza del resorte La fuerza del resorte rigido se modelan mediante un resorte FENE-Fraenkel que es muy usado en modelamiento de cadenas poliméricas [178], [83], [193] y cuya expresion es:

$$\mathbf{f}_i^{j,\text{Spring}} = - \frac{H_q \left(1 - \frac{Q_{\text{eq}}}{Q_i}\right)}{1 - \left(\frac{Q_i - Q_{\text{eq}}}{Q_0 - Q_{\text{eq}}}\right)^2} \mathbf{Q}_i \quad (4.2)$$

Donde Q_0 es la longitud maxima del resorte, Q_{eq} es la longitud del equilibrio del resorte, $\mathbf{Q}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i$ es la distancia entre los dos beads (dipolo), $Q_i = \|\mathbf{Q}_i\|$. Las longitudes de equilibrio es $Q_{\text{eq}} = l$ la maxima es $Q_0 - Q_{\text{eq}} = l * 3$ y la constante del resorte $H_q = \frac{0,01}{2l} \|\mathbf{f}_i^f\|$.

Fuerza de volumen de exclusión Las fuerzas externas debido al volumenes de exclusión se dividen en dos, una fuerza de exclusion entre nadadores $\mathbf{f}_i^{j,\text{Exclu}}$ y una fuerza de volumen de exclusión entre los beads y las paredes $\mathbf{f}_i^{j,\text{wall}}$. Como los nadadores son alargados, pueden utilizarse los mismos potenciales de Volumenes de exclusion entre dos moleculas alargas, como cristales liquidos, aminoacidos y polimeros, por lo tanto dichas fuerzas se modelan como fuerzas derivadas de un potencial Gay-Berne. [194], [89], [116]. Este potencial depende de las distancias entre los centros de masa de dos dipolos y de las direcciones de cada uno. El Potencial entre dos nadadores A y B depende de la distancia de separación $\mathbf{s} = \mathbf{r}_c = \mathbf{x}_{Ac} - \mathbf{x}_{Bc}$ (medido desde el centro de masa), los vectores directores unitarios de cada uno $\hat{\mathbf{a}}$ y $\hat{\mathbf{b}}$ [194]. El termido de la fuerza, derivado de un potencial de Gay-Berne, \mathbf{f}_j^{GB} que experimenta un nadador A debido debido a otro es [194]:

$$\mathbf{f}_A^{\text{GB}} = \frac{\partial U}{\partial \mathbf{s}} \hat{\mathbf{s}} - s^{-2} \frac{\partial U}{\partial \theta} [\boldsymbol{\kappa} - (\boldsymbol{\kappa} \cdot \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathbf{s}}] \quad (4.3)$$

Donde θ es el angulo entre los vectores directores de cada uno. El torque generado experimentado por un nadador A debido a la interaccion con otro nadador se define como [194]:

$$\boldsymbol{\tau}_A = s^{-1} \left(\frac{\chi((\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{a}}) - \chi(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{b}}))}{1 - (\chi \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})^2} \right) \frac{\partial U}{\partial \theta} \times \boldsymbol{\kappa} \quad (4.4)$$

El torque generado experimentado por B debido a la interaccion con una molecula A se define como:

$$\boldsymbol{\tau}_B = s^{-1} \left(\frac{\chi((\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{b}}) - \chi(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{a}}))}{1 - (\chi\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})^2} \right) \frac{\partial U}{\partial \theta} \times \boldsymbol{\kappa} \quad (4.5)$$

Finalmente las fuerzas experimentadas en cada bead i debido a la fuerza y al torque experimentados por el nadador j (con un vector director $\hat{\mathbf{d}}_j$ del dipolo) por la prescencia de otros nadadores se expresa como:

$$\mathbf{f}_i^{j,\text{Exclu}} = 0,5\mathbf{f}_j^{\text{GB}} + (1 - 2\delta_{i2})\boldsymbol{\tau}_j^{\text{GB}} \times \frac{\hat{\mathbf{d}}_j}{l} \quad (4.6)$$

Los terminos $\frac{\partial U}{\partial \mathbf{s}} \hat{\mathbf{s}}$, $\frac{\partial U}{\partial \theta}$ y $\boldsymbol{\kappa}$, asi como la derivacion completa del potencial de Gay-Berne se exponen en el Apendice A.

Fuerza entre beads y las paredes Las Fuerzas entre las beads de los nadadores y las paredes se modelan mediante la parte repulsiva del potencial de Lennard-Jones excluido [195]de forma que la fuerza ejercida por las paredes en cada bead i es de un nadador j es:

$$\mathbf{f}_i^{j,\text{wall}} = -24\epsilon \left(2 \left(\frac{\sigma}{r_{iw}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{iw}} \right)^6 \right) \frac{\hat{\mathbf{u}}_{i,w}}{r_{iw}} \quad (4.7)$$

Donde $\hat{\mathbf{u}}_{i,w} = \frac{\mathbf{r}_{iw}}{r_{iw}}$, es un vector director unitario, $r_{iw} = (H - \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{e}_3)$ es la distancia entre los beads del nadador y la pared, $\sigma = l/2 = 3a/2$ escalado con el tamano del bead y $\epsilon = |\mathbf{f}_i^{j,f}|a \sim \zeta V_{\text{dumb}}a$, es escalado con la energıa caracteristica del nadador .

Adicional a los beads de los nadadores tambien se introdujeron trazadores en el dominio de simulacion. Los trazadores son partıculas lagranianas de el fluido, y dan informacion sobre las propiedades termodinamicas y sobre la velocidad del fluido. Los trazadores no interaccionan entre si, y solo se paplica una fuerza de repulsion suave (Primer termino de la ecuacion 4.7) entre los trazadores y las paredes $\mathbf{f}_i^{j,\text{wall}}$ para que no salgan del dominio.

Fuerza del flagelo La fuerza del flagelo que es consante se define como:

$$\mathbf{f}_j^{j,\text{fl}} = \zeta V_{\text{dumb}} \hat{\mathbf{d}}_j / l \quad (4.8)$$

El arrastre que experimenta una bead i , se puede escribir como:

$$\mathbf{f}_i^{j,r} = -\zeta \left(\mathbf{v}_i^j(\mathbf{x}_i) - \mathbf{u}_i^j(\mathbf{x}_i) \right) \quad (4.9)$$

Stokeslet para una suspensión confinada

$\mathbf{u}_i^j(\mathbf{x}_i)$ es la velocidad del fluido en la posición de la bead i . La velocidad del fluido se describe mediante la ecuación de Stokes:

$$\begin{aligned} \mu \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \nabla P &= -\boldsymbol{\rho}(\mathbf{x}) = \sum_j^N \mathbf{f}_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \\ \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Las condiciones de frontera para la ecuación 4.2 son, condiciones Dirichlet, sin deslizamiento en las paredes $\mathbf{u}(x, y, -H) = \mathbf{0}$, $\mathbf{u}(x, y, H) = \mathbf{0}$ y periódicas en las direcciones x y y .

$\mathbf{v}_i^j(\mathbf{x}_i)$ es la velocidad de cada partícula del nadador, que puede escribirse como:

$$\mathbf{v}_i^j(\mathbf{x}_i) = \mathbf{u}_i^j(\mathbf{x}_i) + \frac{\mathbf{f}_i^{j,\text{ext}}}{\zeta} + \frac{\mathbf{f}_i^{j,S}}{\zeta} + \frac{\delta_{i1} \mathbf{f}_i^{j,f}}{\zeta} \quad (4.11)$$

Las fuerzas que experimenta el fluido debido a la presencia de cada nadador j en la posición \mathbf{x}_i .

La velocidad de un de fluido para un bead \mathbf{x}_i en presencia de los demás beads \mathbf{x}_k se escribe mediante la función de Green:

$$\mathbf{u}_i^j(\mathbf{x}_i) = \sum_l^N \sum_k^2 \left(\mathbf{G}(\mathbf{x}_i^j, \mathbf{x}_k^l) \right)^\top \cdot (\mathbf{f}_k^{l,\text{ex}} + \mathbf{f}_k^{l,S}) \quad (4.12)$$

La función de Green que contiene las interacciones entre nadadores y entre nadadores y superficies sólidas es [31], [32], [50], [193]:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_i^j, \mathbf{x}_k^l)^\top = (1 - \delta_{k2} \delta_{lj}) \mathbf{G}^{\text{OB}}(\mathbf{x}_i^j - \mathbf{x}_k^l) + \mathbf{G}_{\text{wall}}(\mathbf{x}_i^j, \mathbf{x}_k^l) (\delta_{lj} + \delta_{k2} \delta_{lj}) \quad (4.13)$$

Utilizando las ecuaciones 4.11, 4.12 y 4.13 se llega a:

$$\frac{d\mathbf{x}_i^j}{dt} = \frac{\delta_{i1} \mathbf{f}_i^{j,f}}{\zeta} + \sum_l^N \sum_k^2 \left(\frac{\boldsymbol{\delta}}{\zeta} + \mathbf{G}(\mathbf{x}_i^j, \mathbf{x}_k^l) \right)^\top \cdot (\mathbf{f}_k^{l,\text{ex}} + \mathbf{f}_k^{l,S}) \quad (4.14)$$

Reorganizando los terminos, en forma de la ecuaci3n 3.8 como:

$$\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{M}(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{F}^{\text{ex}} + \mathbf{F}^{\text{S}}) + \frac{\mathbf{F}_k^{\text{fl}}}{\zeta} \quad (4.15)$$

Que es similar a la ecuaci3n 3.8.

Donde $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ Es la matriz de movilidad para un conjunto de $6N$ puntos de fuerza. Las Ecuaciones a solucionar en el modelo son:

$$\mathbf{R}(t + \Delta t) = \mathbf{R}(t) + \Delta t \left(\mathbf{M}(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{F}^{\text{ex}} + \mathbf{F}^{\text{S}}) + \frac{\mathbf{F}^{\text{fl}}}{\zeta} \right) \quad (4.16)$$

Ecuaci3n de balance para el escalar

La concentraci3n de un escalar $C(\mathbf{x})$, con una difusividad D . Esta sustancia tendria una difusividad superior al valor de una proteina generica, ya que en una escala de μ el transporte difusivo es muy ineficiente y en este trabajo se quiere obtener informaci3n del impacto de la quimiotaxis sobre la mezcla y transporte de una sustancia en estas escalas. La ecuaci3n de evolucion del escalar (especie quimio atractora) es:

$$\frac{\partial C(\mathbf{x})}{\partial t} + \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla C(\mathbf{x}) = D \nabla^2 C(\mathbf{x}) \quad (4.17)$$

Se decidio utilizar un escalar que tubiese una concentraci3n constante en la caja por lo tanto no se considera la salida o entrada de masa al dominio de simulaci3n. Por lo tanto las condiciones de frontera del escalar son condiciones de Newman en las paredes: $\frac{dC(\mathbf{x})}{dz} \Big|_{z=-H} = 0$ y $\frac{dC(\mathbf{x})}{dz} \Big|_{z=H} = 0$.

Para distinguir entre cada una de las suspensiones a modelar se nombraron a cada suspnesion con un modo de nado caracteristico como:

Suspensi3n no interactuante (NI) es la suspnesion de nadadores que no interactuan con una sustancia quimio-atractora (escalar) y la fuerza del flagelo no cambia de direcci3n.

Suspensiones Interactuantes son las suspnesiones que emulan la quimiotaxis y su movimiento depende de un parametro asociado a la concentraci3n promedio de la sustancia quimio-atractora, en este trabajo se modelaron dos variantes de esta suspnesi3n. Finalmente una tercera suspnesi3n cuyos nadadores realizan un movimiento de Run-Tumbling sin interactuar con un escalar en el medio, se denominaron como Suspnesiones con **Probabilidad Impuesta (Prob)** y el movimiento de cada nadador en cada paso de tiempo dependen el

movimiento ams probable.

Quimiotaxis y Probabilidades

Suspension Interactuante: Quimiotaxis modelo On-Off

Como se mencionó en el capítulo de estado del arte la quimiotaxis es un proceso complejo de señalización y la adaptación de un microorganismo en presencia de una sustancia quimioatrayente, mientras que en catalizadores activos depende de la cantidad energía química transformada en mecánica, entregada de las reacciones químicas sobre la superficie del catalizador al medio. Como en este trabajo se quiso analizar el efecto del movimiento de un nadador **Interactuante** (termino que se usara para referirse a la quimiotaxis) sobre el movimiento colectivo resultante de la suspension, el modelo de quimiotaxis se simplifico en un modelo **On-Off** similar a un actuador. El cambio en el movimiento de un nadador que esta haciendo un *Run* a un *Tumbling*, depende del valor de un escalar (sustancia quimioatrayente) $C(\mathbf{x}_m)$, donde \mathbf{x}_m es un punto cercano al centro de masa de cada nadador.

El modelo *On-Off* es un actuador que toma una decisión sobre la dirección de la fuerza $\mathbf{f}_i^{j,fl}$. La elección de la dirección del flagelo es totalmente aleatoria. El actuador cambia la dirección respecto a un valor C_{target} del escalar ecuació 4.18:

$$\mathbf{f}_i^{j,fl} = \begin{cases} run, & \text{if } C(\mathbf{x}_m) \leq C_{target} \\ tumble, & \text{if } C(\mathbf{x}_m) > C_{target} \end{cases} \quad (4.18)$$

La rotación del flagelo depende de la concentración umbral en la cual se establece que el modo de nado de los nadadores depende de una C_{target} y por simplicidad de calculo en base a una concentracion promedio \bar{C}_{prom} . En este trabajo se definió la relación de la concentración, como $C_{target} = \chi * \bar{C}_{prom}$, donde χ es una constante que se puede elegir entre 0 – 1 el cual es un factor asociado a la sensibilidad del nadador por el nutriente.

La ecuación 4.18 se puede ajustar para que los nadadores de una suspensión Interactuante (o con quimiotaxis) tengan un movimiento Run-Tumbling RT o un movimiento Tumbling-Runing TR. La diferencia entre los movimientos RT y TR depende del condicional de la ecuació 4.18. Para una suspensión intractuante de nadadores con un modo $R - T$, cada nadador hace un *Tumbling*(Rotacion aleatoria) si $C(\mathbf{x}_m) > C_{target}$ de lo contrario hace un *Run*. Por otro lado suspensiones interactuante de nadadores con un modo TR, cada nadador realiza un *Run* si $C(\mathbf{x}_{cm}) > C_{target}$ de lo contrario hace un *Tumbling*.

La acci3n del flagelo sobre el bead del nadador, en presencia de una campo de concentraci3n de una especie quimica $C(\mathbf{x})$, es realizar un torque de tal forma que el nadador hace un *Tumbling*, RT o empujar al nadador en la direcci3n del dipolo *Run*.

Donde C_{target} es un parametro que se define a partir de la concentracion promedio de la caja \bar{C}_{prom} , que no podemos confundir con la concentracion homogenea del escalon \bar{C}_{hom} . El *Run* se hace mediante el uso de la ecuaci3n 4.8 cuya diecci3n es la direcci3n es la del dipolo.

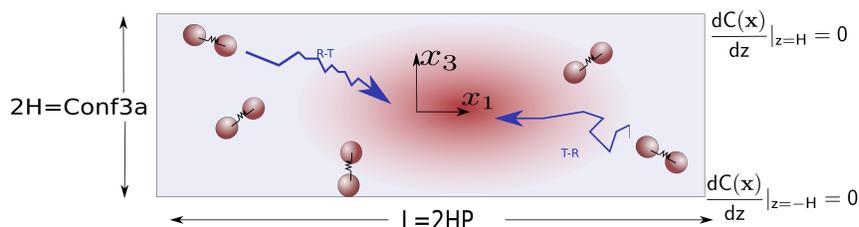


Figura 4-3: Esquema que representa el resultado buscado en la simulaci3n, el rojo representa el escalon con sus respectivas condiciones de frontera en las paredes y con el posible comportamiento de las suspensiones interactuantes (quimiotaxis) con el modelo On-Off.

Suspension Probabilida Impuesta

Las suspensiones (*Prob*), son suspensiones donde cada nadador realiza un nado *Run* o un tumbling *Tumbling*, acorde a una distribuci3n exponencial de la forma $P_{run} = \exp(-\Delta t/\tau_{run})$ [48], [196], [13]. Para que un nadador realice un *Run* se toma un numero aleatorio que sea menor a P_{run} . Mientras que para un *Tumbling* el numero aleatorio debe ser menor al valor de la probabilidad de $P_{tumb} = \exp(-\Delta t/\tau_{tumb})$. Donde $(-\Delta t)$ es el tiempo que tarda en moverse un bead una determinada longitud (porcentaje de distancia del bead), τ_{run} es el tiempo de run y τ_{tumb} es el tiempo de tumbling que podemos definir como $\tau_{tumb} = \lambda_{tumb-run}\tau_{run}$, $\tau_{run} = \lambda_{run}\delta t_l$, donde $\lambda_{tumb-run}$ y λ_{run} es un parametro de ajuste, para una celula de *E. coli* $\tau_{tumb} < \tau_{run}$.

Adimensionalizaci3n de variables: Tamanos y Tiempos Caracteristicos

Se usaran los siguientes tamanos caracteristicos para adimensionalizar las variables y simplificar el analisis de los resultados.

- a el radio del bead
- V_{dumb} Velocidad del nadador (dumbell)

- l tamaño del dipolo
- l_{dumb} tamaño del nadador
- C_0 Concentración inicial del escalar

La posición de los nadadores y de los nodos (continuo) $\mathbf{x} = \frac{\mathbf{x}}{a}$. La velocidad del fluido $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x})}{V_{\text{dumb}}}$, la fuerza $\mathbf{f}_i^j(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{f}_i^j(\mathbf{x})}{\xi V_{\text{dumb}}}$, la energía característica $\xi V_{\text{dumb}} a$. $\delta t_a = \frac{a}{V_{\text{dumb}}}$ es el tiempo de nado del bead, $C(\mathbf{x}) = \frac{C(\mathbf{x})}{C_0}$ es la concentración del escalar. Por lo que la ecuación 4.10 se rescriben dando como resultado una presión adimensional escalada con $\frac{\sigma_{\text{dumb}} \mu}{a}$ y la densidad de fuerzas adimensional escalada con $\frac{V_{\text{dumb}} \xi}{a^3}$.

$$\frac{1}{6\pi} \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \nabla P = - \sum_j^N \mathbf{f}_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \quad (4.19)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0$$

La ecuación 4.17 se rescribe dependiendo de la relación entre el tiempo de nado δt_a y el tiempo difusivo $\delta t_D = \frac{a^2}{D}$. Y se define el número de Peclet como: $Pe = \frac{V_{\text{dumb}} a}{D} = \frac{\delta t_D}{\delta t_a}$.

Si $\delta t_a \leq \delta t_D$.

$$\frac{\partial C(\mathbf{x})}{\partial t} + \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla C(\mathbf{x}) = \frac{1}{Pe} \nabla^2 C(\mathbf{x}) \quad (4.20)$$

La ecuación de evolución de cada bead, en notación de índices (ecuación 4.16) es :

$$\frac{d\mathbf{x}_i^j}{dt} = \left(\mathbf{u}_i^j(\mathbf{x}_i) + \mathbf{f}_i^{j,ext} + \mathbf{f}_i^{j,S} + \delta_{i1} \mathbf{f}_i^{j,f} \right).$$

Si $\delta t_a > \delta t_D$. En este caso se utiliza el tiempo de difusión de la especie quimioattractora como paso temporal.

$$\frac{\partial C(\mathbf{x})}{\partial t} + Pe \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla C(\mathbf{x}) = \nabla^2 C(\mathbf{x}) \quad (4.21)$$

Por tanto en el caso que el tiempo difusivo sea menor que el tiempo de nado, la ecuación de evolución del nadador 4.11 queda como:

$$\frac{d\mathbf{x}_i^j}{dt} = Pe \left(\mathbf{u}_i^j(\mathbf{x}_i) + \mathbf{f}_i^{j,ext} + \mathbf{f}_i^{j,S} + \delta_{i1} \mathbf{f}_i^{j,f} \right) \quad (4.22)$$

Por lo que la relacion entre el tiempo de nado y el tiempo de difusion es $\delta t_a = \frac{1}{Pe} \delta t_D$. En este trabajo se solucionara las ecuaciones 4.19-4.20, con su respectiva ecuación de evolución para la posición de los bead y trazadores. El sistema se solucionara con el Metodo llamado GgEm, sin embargo antes de emplearlo en la simulación, el sistema (los nadadores) debe estar en equilibrio mecanico, ecuación 4.1, por lo tanto antes de incorporar las ecuaciones del fluido, el sistema debe cumplir que $\frac{d\mathbf{x}_i^j}{dt} - \left(\mathbf{f}_i^{j,ext} + \mathbf{f}_i^{j,S} + \delta_{i1} \mathbf{f}_i^{j,f} \right) = \mathbf{0}$. Para esto se requiere de un tiempo de calculo llamado tiempo de equilibración.

Metodo de Solucion Hidrodinamica GGEM

Para encontrar las funciones de Green asociadas a las paredes y a las particulas de la suspension se usa un metodo llamado GgEm (General geometry Ewald like method), el cual es un metodo regularizado basado en las sumas Ewald para sistemas confinados [185], [116]. Como se mostro en el capítulo anterior, el metodo de las sumas de Ewalds depende de la elección de una función $g(\alpha, \mathbf{x})$ que, a su vez, depende un parametro α . En este método no se necesita ensamblar la matriz de movilidad, ni realizar la operación $\mathbf{M}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}$ que es de orden $N \times N$ y permite simular una suspension en limite diluto $\phi > 0,1$. Como muchos otros metodos acelerados de sumas de Ewald [182], [183] GGEM es un metodo de orden N , lo cual es mucho mas eficiente que metodos convencionales para simulaciones multiescala [31]. Basados en la filosofia del método de Sumas de Ewald se puede escribir el termino del lado derecho de la ecuación A.2 divide en dos funciones, una asociada a las interacciones de largo alcance $\boldsymbol{\rho}(\mathbf{x})_{far}$ y otra asociada a las interacciones de corto alcance $\boldsymbol{\rho}(\mathbf{x})_{near}$. El termino de corto alcance contiene la función delta de dirac y es suavizada por una funcion $g(\mathbf{x})$ y el otro termino de largo alcance solo contiene la funcion $g(\mathbf{x})$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\rho}(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\rho}(\mathbf{x})_{near} + \boldsymbol{\rho}(\mathbf{x})_{far} \\ \boldsymbol{\rho}(\mathbf{x})_{near} &= \sum_j^N \sum_i^2 \mathbf{f}_i (\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) - g(\mathbf{x})) = \mathbf{f}_i g(\mathbf{x}) \mathbf{f}_i (\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) - g(\mathbf{x})) \\ \boldsymbol{\rho}(\mathbf{x})_{far} &= \sum_j^N \sum_i^2 \mathbf{f}_i g(\mathbf{x}) = \sum_i^{2N} \mathbf{f}_i g(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{4.23}$$

De igual forma la velocidad puede descomponerse en dos contribuciones.

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{x})_{near} + \mathbf{u}(\mathbf{x})_{far} \tag{4.24}$$

la funcion $g(\mathbf{x})$ que mejor representa la contribucion de un monopolo de fuerzas es:

$$g(\mathbf{x}) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \exp(-\alpha^2 r^2) \left(\frac{5}{2} - \alpha^2 r^2 \right) \quad (4.25)$$

$$\frac{1}{6\pi} \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x})_{near} - \frac{1}{6\pi} \nabla P_{near} = - \sum_i^{2N} \mathbf{f}(\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) - \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \exp(-\alpha^2 r^2) \left(\frac{5}{2} - \alpha^2 r^2 \right)) \quad (4.26)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x})_{near} = 0$$

Como el termino del campo cercano contiene los terminos asociados a la interaccion hidrodinámica entre los nadadores (sin tener en cuenta las paredes) se puede obtener una expresion analitica para $\mathbf{u}(\mathbf{x})_{near}$ a travez de una funcion de Green en un dominio teorico, mediante minima imagen. Utilizando transformada rapida de fourier o armonicos esfericos [59], [189], [179], [181], [174] y la solucion es:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x})_{near} = \sum_i^{2N} \left(\frac{6}{8} \left(\frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{x}_i \otimes \mathbf{x}_i}{r^3} \right) \text{erf}(\alpha r) + \frac{6}{8} \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{x}_i \otimes \mathbf{x}_i}{r^2} \right) \frac{2\alpha e^{\alpha^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \right) \cdot \mathbf{f}_i \quad (4.27)$$

Para evitar el overlap entre los radios hidrodinamicos de los beads de cada nadador, se realiza una regularizacion , [189], [179], [181], [174], [180], [31] de tal forma que el campo cercado se reescribe como:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x})_{near} = & \sum_i^{2N} \left(\frac{6}{8} \left(\frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{x}_i \otimes \mathbf{x}_i}{r^3} \right) (\text{erf}(\xi r) - \text{erf}(\alpha r)) \right. \\ & \left. + \frac{6}{8} \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{x}_i \otimes \mathbf{x}_i}{r^2} \right) \left(\frac{2\xi e^{\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} - \frac{2\alpha e^{\alpha^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \right) \right) \cdot \mathbf{f}_i \end{aligned} \quad (4.28)$$

Donde α es un coeficiente que se elige por conveniencia computacional y $\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{3}$ es el coeficiente de regularizacion.

$$\frac{1}{6\pi} \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x})_{far} - \frac{1}{6\pi} \nabla P_{far} = - \sum_i^N \mathbf{f} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \exp(-\alpha^2 r^2) \left(\frac{5}{2} - \alpha^2 r^2 \right) \quad (4.29)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x})_{far} = 0$$

Las condiciones de frontera son:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}(x, y, -H)_{far} &= -\mathbf{u}(x, y, -H)_{near} \\ \mathbf{u}(x, y, H)_{near} &= -\mathbf{u}(x, y, H)_{near}\end{aligned}$$

La velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{x})_{near}$ se calculo en todo el dominio de simulación (nodos de la malla) y para todos los beads, de los nadadores, y para los trazadores, usando la ecuación 4.28. Cuando se obtiene la solución de la ecuación 4.29. Se usa el resultado de la ecuación 4.29 para encontrar la velocidad de todos los beads y trazadores mediante una interpolación de lagrange, para la velocidad, entre los puntos de la malla y las posiciones de los trazadores y beads de los nadadores, luego para encontrar la velocidad total se suma la velocidad interpolada en cada bead con la calculada con la ecuación 4.28. En los nodos de la malla se suma la velocidad obtenida por la ecuación 4.28 y la ecuación 4.29. Finalmente se soluciona la ecuación 4.20. Debido a que la elección del parametro α garantiza una rapida convergencia siguiendo las recomendaciones de [31], [95], [89], [34], [49], [32] la cual es la siguiente: α esta determinado por:

$$\begin{aligned}M_{x,y} &= \sqrt{2}\alpha L_{x,y} \\ M_z &= 4\sqrt{2}\alpha H\end{aligned}\tag{4.30}$$

Donde M_x y M_z son la cantidad de nodos en las direcciones periodicas y confinada.

Solucion \mathbf{u}_{far} y del campo de concentracion en el espacio de Fourier

Las ecuaciones 4.29 y 4.19 se solucian con un metodo hibrido diferencias finitas-DFFT, DFFT (Discrete Fast Fourier Transform). Este metodo garantiza la periodicidad en la caja. Los detalles de la Transformación en el espacio de Fourier para Las ecuaciones 4.29 y 4.19 y su discretización con el metodo de diferencias Finitas se detalla en el apendice B y C. Usando las definiciones de las ecuaciones B.10-B.13 en las ecuaciones 4.20 y 4.29 en el espacio de Fourier son:

$$\frac{1}{6\pi} \left(-\|\mathbf{k}\|^2 \hat{u}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial^2 \hat{u}(\mathbf{k}, z)}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{6\pi} i k_x \hat{P}(\mathbf{k}, z) = -\hat{\rho}_x(\mathbf{k}, z)\tag{4.31}$$

$$\frac{1}{6\pi} \left(-\|\mathbf{k}\|^2 \hat{v}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial^2 \hat{v}(\mathbf{k}, z)}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{6\pi} i k_y \hat{P}(\mathbf{k}, z) = -\hat{\rho}_y(\mathbf{k}, z)\tag{4.32}$$

$$\frac{1}{6\pi} \left(-\|\mathbf{k}\|^2 \widehat{w}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial^2 \widehat{w}(\mathbf{k}, z)}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{6\pi} \frac{\partial \widehat{P}(\mathbf{k}, z)}{\partial z} = -\widehat{\rho}_z(\mathbf{k}, z) \quad (4.33)$$

$$ik_x \widehat{u}(\mathbf{k}, z) + ik_y \widehat{v}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial \widehat{w}(\mathbf{k}, z)}{\partial z} = 0 \quad (4.34)$$

La ecuación de Diffusion conveccion, ecuación 4.35:

$$\frac{\partial \widehat{C}(\mathbf{k}, z)}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \left(-\|\mathbf{k}\|^2 \widehat{C}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial^2 \widehat{C}(\mathbf{k}, z)}{\partial z^2} \right) - \widehat{f}_C(\mathbf{k}, z) \quad (4.35)$$

Donde $\widehat{f}_C(\mathbf{k}, z) = FFT(\mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla C(\mathbf{x}))$.

El termino convectivo se discretiza usando un esquema upwind (o hacia adelante) de primer orden [36], [65]. Para solucionar las ecuaciones de 4.31 a 4.35 se utiliza el metodo de diferencias finitas en un esquema implicito. El detalle de la discretización se puede encontrar en el apendice B.

El tamaño del paso en el tiempo se eligio como $\Delta t = 1\%$, el cual es apadtativo para que para que cada punto de fuerza se mueva un 1 porciento de su tamaño caracteristico a es decir un $1\% \delta t_a$. Para incorporar la solución de la la ecuación 4.29 en cada bead y trazador se utilizó una interpolación de Lagrange, utilizando 9 nodos de la malla (3 por cada dirección $x_1 = x, x_2 = y$ y $x_3 = z$) por cada punto de fuerza.

El tamaño de la malla tambien debe satisfacer las condiciones de estabilidad de Courant. Para asignar la fuerza del flagelo en el caso de la quimiotaxis, se usaron los nodos mas cercanos a la posición del nadador, con información sobre la concentración del escalar y se usara la ecuación 4.16. El tumbling, tanto en suspensiones con quimiotaxis como con probabilidades impuestas, se realizo mediante una rotación en una dirección aleatoria y se calcula mediante un torque entre el flagelo y la longitud del dipolo.

Diseño de Experimentos

Como se dijo en secciones anteriores, se simularon suspensiones de nadadores con tres tipos de modos de nado diferentes, los cuales son:

- Suspensiones NI: Sin quimiotaxis

- Suspensiones Prob: Sin Quimiotaxis
- Suspensiones interactuantes Runing-Tumbling (T): Quimiotaxis
- Suspensiones interactuantes Tumbling-Runing (TR): Quimiotaxis

Los parámetros a cambiar en las simulaciones y que pueden tener un impacto sobre la dinámica de la misma, son los siguientes:

Condiciones y parámetros a variar

- Cantidad de nadadores.
- Difusividad del escalar.
- Tamaño del canal.
- Condiciones iniciales del escalar.

Parámetros y Condiciones de Simulación

Tamaño del canal.

El canal periódico en tiene las siguientes longitudes, con base a los resultados de Underhill y colaboradores [31], [32]: el confinamiento será de $H = 15a$, en forma adimensional $H = 15$, el largo de cada lado es $L_x = L_y = 60a$. La variación del tamaño del canal se realizó con un $H = 30a$.

Fracción Volumétrica.

El número de nadadores, N en un canal de dimensiones $L^2 * 2H$, se calculó utilizando la fracción volumétrica Φ que es: $\Phi = \frac{4\pi N(l)^3}{3L^2H}$. Se simuló suspensiones con concentraciones de nadadores definidas en regímenes dilutos y semidilutos de Φ . La elección de Φ se realizó con base a estudios previos [165], [32], [87]. Los valores Φ en los regímenes se establecieron como: régimen semidiluto o semidiluido es a partir de $\Phi > 0,1$ mientras que régimen diluido y muy diluidos son $\Phi < 0,1$. Las fracciones volumétricas Φ usadas se resumen en la tabla 4-1:

Tabla 4-1: Fracciones Volumetricas

	Φ	Nadadores
1	0.005	20
2	0.053668	205
3	0.078539	300
4	0.154461	590
5	0.20000	760

Numeros de Peclet.

Con el fin de observar el efecto de la quimiotaxis sobre la suspensión, se variaron las difusividades del escalar D . El numero de Peclet Pe da cuenta de la difusividad en forma adimensional. En la seccion anterior $Pe = \delta t_D / \delta t_a$. El tiempo de nado de cada bead (de cada nadador) a es $\delta t_a = \frac{a}{v_{dumb}}$. El tiempo de difusion es $\delta t_D = \frac{a^2}{D}$.

Los Pe se variaron desde 2 hasta 2000, de la siguiente forma: $Pe = 2, 20, 200, 2000$ para asegurar que $\delta t_a < \delta t_D$ ecuación 4.20. La eleccion de $Pe = 2$ se realizo tomando como referencia la difusividad de nutrientes con difusividades muy bajas como proteinas de suero de albumina, materia organica marina, entre otros [173], [197], [133].

En la suspensión TR solo se usaron Peclets de 2 y 2000 para las condiciones iniciales del escalar y las 5 fracciones volumetricas.

Condiciones inciales para la concentración de la sustancia quimioattractora.

El escalar(sustancia quimioattractora) tiene dos condiciones iniciales diferentes para cada simulación; la primera distribución son dos esferas ubicadas en el centro de la caja (Condición I) y la segunda es una Barra o region delimitada (condición II). Ambas distribuciones cumplen las condiciones de Newman en las paredes de la caja Figura 4-4.

La concentración promedio del escalar (de forma adimensional) en la caja

$\bar{C}_{prom} = \sum_{\mathbf{r}} C(\mathbf{r}) / (L^2 H) = 0,107685185185185$ es igual para las dos condiciones iniciales Esferas (I) y Barra (II) Figura 4-4. El radio de la esfera en a es: $r = 6a$. Las dimensiones de la barra en a son: en el eje y (largo) es $L_y = 20l = 60a$, tamaño en el eje x (el ancho) es $L_x = 1,035l$ (ancho) y en el eje z (el alto) es $H = 2l$.

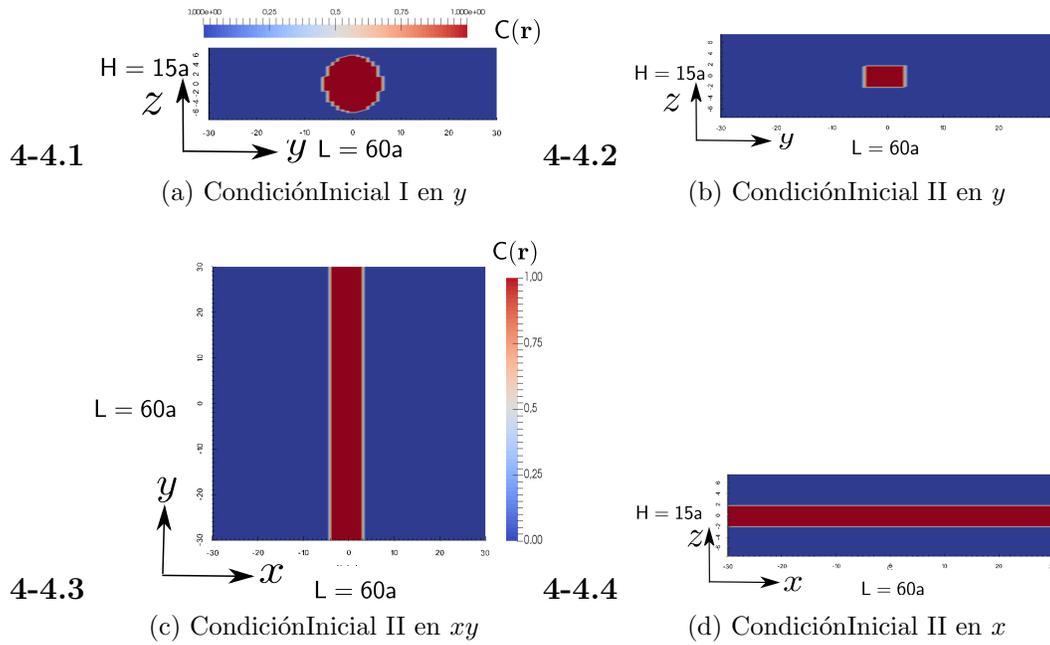


Figura 4-4: Condiciones iniciales de concentración del escalar, adimensionalizada con la concentración inicial C_0 .

Tabla 4-2: Diseño de Experimentos

Experimentos	Pe	Caja		Φ	Escalar		N^{ro} Exp
		H	$L = 2PH$		C.I.	Quimiotaxis	
NI	2000	15a	60a	0.005-0.2	–	No	5
RT	2-2000	15a	60a	0.005-0.2	(I),(II)	yes	40
TR	2,2000	15a	60a	0.005-0.2	(I),(II)	yes	20
Probb	–	15a	60a	0.005-0.2	–	No	5
RT	2000	30a	120a	Φ_2, Φ_4, Φ_5	(I),(II)	yes	6

P es el periodo que esta tabla es de $P = 4$.

En este trabajo (en forma adimensional) $C_{target} = \chi * \overline{C}_{prom}$, se eligió al factor de quimiotaxis como $\chi = 0,33$

Variación de H .

Alternativamente se tiene un sistema R-T con $H = 30a$ y $L = 120$ para $Pe=2000$ y para Φ_2, Φ_4, Φ_5 , Es decir que para el aumento de H solo hay 6 experimentos considerando las

condiciones (I) y (II).

El diseño de experimentos tomando en cuenta las consideraciones mencionadas en el inicio de esta sección, es decir un nadador de largo $l_{\text{dumb}} = 5a$, donde a es el radio del bead (para considerar fuerzas de exclusión) y el dipolo de fuerzas de largo $l = 3a$, estan resumidos en la Tabla 4-2.

La variacion de H se realizo solo con suspensiones interactuantes $R - T$ a un determinado Pe .

El resumen de los parentros fijos en la simulación estan en la Tabla 4-3.

Aqui $\lambda_{\text{run}} = 0,05$, mientras que $\lambda_{\text{tumb}} = 0,5$.

Criterios de estabilidad Numerica .

La elección de Δt del sistema y el tamaño de paso de la malla se evaluo mediante el criterio de estabilidad de Von-Neuman el cual establece que $\frac{\Delta t D}{(\Delta z)^2} \leq 0,5$. Tomando como $\Delta t = 1\% \delta t_a$ en segundos (porcentaje de movimiento del bead)s y un tamaño de malla $\Delta z = 0,0554$ en μm . Por lo anterior el Δt y Δz propuestos son los adecuados. Tomando una difusividad $D \sim 10$, los tamaños de tiempo y malla usados siguen siendo los adecuados. El numero de Courant que asegura la convergencia de la ecuación 4.35 calcula como:

$$C_r = 2 \frac{V_{\text{dumb}} \Delta t}{\Delta x} + \frac{V_{\text{dumb}} \Delta t}{\Delta z} = 0,045624.$$

Para realizar un análisis cuantitativo de los resultados de las simulaciones, se calcularon las funciones de auto-correlación para el fluido, espectros de energía cinética, funciones de auto-correlación entre los nadadores y el fluido. Tambien se calcularon las difusividades de los nadadores y de los trazadores en la suspension ademas de las velocidades medias cuadraticas, y finalmente se obtuvieron las funciones de distribucion radial.

Estas funciones se definiran en la siguiente sección.

Definición de las funciones de auto-correlacion para el fluido y de la dinámica de los nadadores

Como el sistema es periodico en 2D y algunas funciones de auto-correlación usualmente se calculan en sistemas totalmente periódicos, en este trabajo se calcularon funciones de auto-correlación en 2D para el fluido y funciones de distribución radial. Para esto se utilizaron diferentes puntos ubicados en el canal en direccion x_3 es decir z , Figura 4-5. En estos puntos se tomaron planos paralelos al eje x_1, x_2 ,y sobre estos se obtuvieron las funciones de auto-correlación, espectros de energia, funciones de distribución. Los planos estan ubicado en

Tabla 4-3: Parametros de simulación Experimentos

Parametro	Simbolo	Definicion
Tiempo de nado del bead	$\delta t_a = \frac{a}{V_{dumbell}}$	0,02s
Tiempo de nado de la bacteria	$\delta t_{dumb} = \frac{5a}{V_{dumbell}}$	0,1s
Velocidad del nadador	$V_{dumbell}$	10 μm
Radio del bead	a	0,2 μm
Longitud del dipolo	$l = 3a$	0,6 μm
Longitud del nadador	$l_{dumb} = 5a$	1,0 μm
Confinamiento	Conf	5
Periodo	P	4
Alto del canal	$2H = Conf * l$	3,0 μm
Longitud canal	$L_x = L_y = 2PH$	12 μm
Tiempo Difusivo	$\delta t_D = \frac{a^2}{D}$	0,04, 0,4, 4, 40 s
Nodos malla $L_x - L_y$	$M_x = M_y$	58
Nodos malla H	M_z	55
Parametro de convergencia	α	0,6853
Tamaño de Malla	$dx = dy$	0,21 μm
Tamaño de Malla	dz	0,0554 μm
Tamaño de tiempo de Integración	$\Delta t_a = 1\% \delta t_a$	2×10^{-4} s
Tiempo de equilibración	$t_{eq} = 1500 \delta t_a$	30 s
Tiempo de adquisición de datos del bead	$t_{ad} = 200 \delta t_a$	4 s
Tiempo de adquisición de datos fluido	$t_{adf} = 20 \delta t_a$	20 s
Numero de Courant	C_r	0,045624
Tiempo de Run	$\tau_{run} = \lambda_{run} \delta t_{dumb}$	0,005 s
Tiempo de Tumbling	$\tau_{tumb} = \lambda_{tumb} \tau_{run}$	0,0025 s
Concentración umbral	C_{target}	0,0355

los siguientes puntos: $x_3 = -0,76H, x_3 = -0,5H, x_3 = 0,0H, x_3 = 0,5H, x_3 = 0,76H$. Luego se calcularon promedios de las funciones anteriores entre $x_3 = -0,76H$ y $x_3 = 0,76H$ y entre $x_3 = -0,50H$ y $x_3 = 0,50H$. Aquí se mostraran los promedios de cada función de autocorrelación, espectro de energia y función de distribución en los planos $x_3 = 0,0H, x_3 = 0,5H, x_3 = 0,76H$.

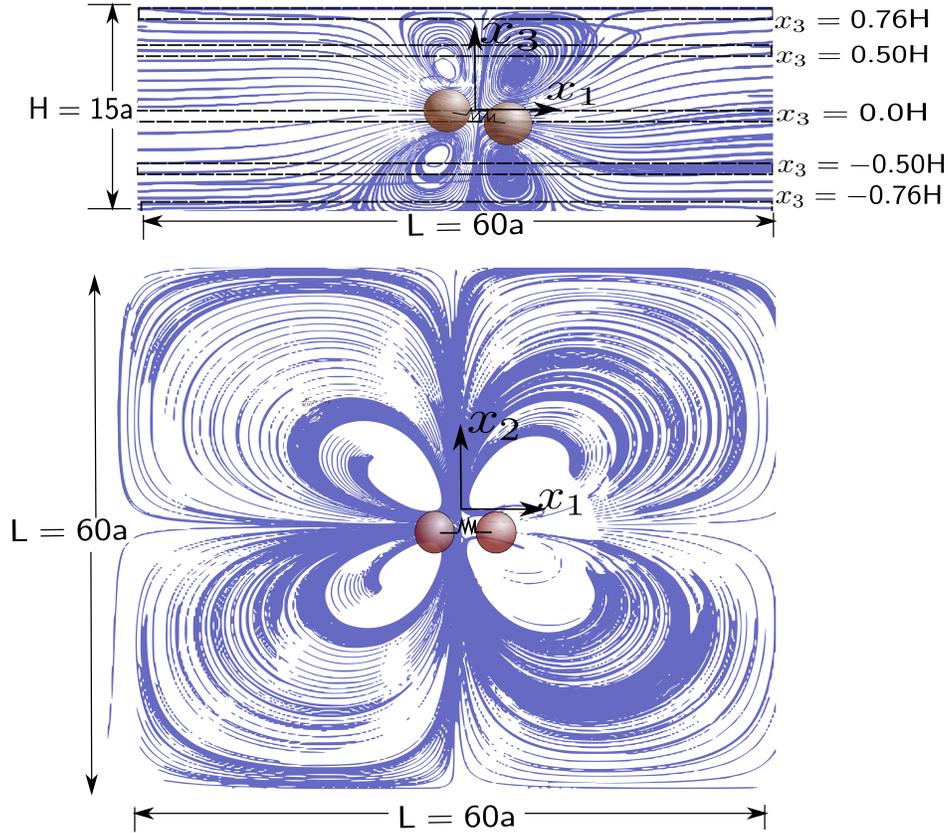


Figura 4-5: Líneas de Corriente generadas por un nadador en el Canal, (a) las líneas punteadas indican la posición de los planos $x_3 = z$, donde serán calculadas las correlaciones para el fluido ($x_1 = x$, $x_2 = y$). (b) La distancia a la cual se va a calcular las funciones de autocorrelación desde el centro de masa del nadador, son de radio $r \sim L/2$.

Dinámica de nadadores y trazadores

La medida más comúnmente usada para caracterizar el comportamiento dinámico y la movilidad de los nadadores, es el desplazamiento cuadrático medio msd (mean square displacement), [32], [74], [146], [87], [107]. En suspensiones de nadadores o partículas activas, la curva del msd tiene dos regímenes, uno balístico donde $n > 1$ para tiempos cortos y el otro donde el sistema alcanza un régimen difusivo $n = 1$, y la pendiente de la curva en este régimen es D , ecuación 4.36 [32], [74]. Aquí se debe entender a D como una movilidad de partículas activas y no como una difusividad. La movilidad está escalada como $D \sim \tau_a/l^2 \sim \tau_a/(9a^2)$ [116], [74].

$$Dt^n = \langle (\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0))^2 \rangle \quad (4.36)$$

Por otro lado otra medida util es la velocidad cuadratica media $\langle u^2 \rangle_{swimmer}$ para nadadores y $\langle u^2 \rangle_{trazadores}$ trazadores, medida desde el centro de masa del nadador y promediada sobre el tiempo de muestreo. En suspensiones activas las velocidades medias cuadraticas se relacionan con la fracción volumetrica de nadadores Φ , de forma $\langle u^2 \rangle_{swimmer} - 1 \sim \Phi$ [32], [116].

Función de distribución radial

Una forma para determinar si una suspensión de partículas presenta agregación, es calcular la función de distribución radial $g(r, x_3)$ [35], [198], [17], [114], [172]. La $g(r, x_3)$ mide la densidad promedio de nadadores, midiendo la distancia de los vecinos de cada nadador. La medida de la distancia r , se calculó desde el centro de masa de cada nadador hasta una radio maximo en $Lx/2 = Ly/2$, ecuación 4.37.

$$g(r, x_3) = 2\pi\rho dr \quad (4.37)$$

Funciones de auto-orrelaciones de velocidad y Cascadas de Energía

En este trabajo se utilizarón funciones de correlación del fluido, para obtener la longitud de auto-correlación del flujo generado por una suspensión de nadadores con quimiotaxis y compar esa longitud con las de suspensiones de nadadores activas y con suspensiones con una probabilidad impuesta.

Tambien se utilizaron espectros de energía cinética que fueron usados para realizar esta comparación.

Cascadas ó espectros de energía cinética

La forma en que se calcularón los espectros de energía $E(\mathbf{k}, x_3)$ se muestra en la Figura 4-6, en la que se calculan como un promedio en los cascarones de los numeros de onda \mathbf{k} en el espacio de Fourier y la parte real se promedia en el tiempo. $E(\mathbf{k}, x_3)$ se define como [106] :

$$E(\mathbf{k}, x_3) = \oint \Phi_{ii}(\mathbf{k}, x_3) dS(\mathbf{k}) = \sum_{k_y} \sum_{k_x} \frac{1}{2} |\Phi_{ii}(\mathbf{k}, x_3)| \delta(\|\mathbf{k}\| - k) \quad (4.38)$$

Donde $\Phi_{ii}(\mathbf{k}, x_3) = \mathbf{u}(\mathbf{k}, x_3) \cdot \mathbf{u}^*(\mathbf{k}, x_3)$, donde $\mathbf{u}(\mathbf{k}, x_3) = \frac{1}{2\pi} \int \mathbf{u}(\mathbf{r}, x_3) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}$ es la velocidad en el espacio de Fourier, $\mathbf{u}^*(\mathbf{k}, x_3)$ es la conjugada compleja de la velocidad.

El espectro es una función en 2D calculada en el espacio de Fourier. Sobre cada cascaron se calcula $\Phi_{ii}(\mathbf{k}, x_3)$ cuando $k \leq \|\mathbf{k}\| < k + dk$.

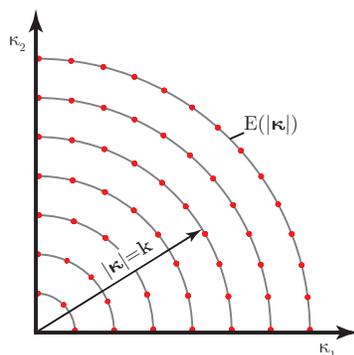


Figura 4-6: Cascarones de integración para $E(\mathbf{k}, x_3)$ en el espacio de Fourier

Con el fin de caracterizar los regímenes de la rata de energía disipativa en el fluido, se calculo una curva el espectro de energía mediante un procedimiento similar al usado en flujos turbulentos [106]. Se calculo el espectro $E(k, x_3)$ en cada uno de los planos x_3 , luego se ajustaron las pendientes del espectro en los regímenes identificados. El ajuste se realizó con una recta tangente al espectro, cuya pendiente es n , que tiene una forma de ley de potencias $E(k, x_3) = E_k k^{-n}$, donde E_k , es un coeficiente de ajuste que se relacionará con el valor de la escala de la energía disipada, en cada régimen. Como la energía es $E(k, x_3) \sim k^{-n}$, y $k = \frac{2\pi}{l}$ la energía del espectro se relaciona con escalas de longitud $E(k, x_3) \sim l^n$. Así entre mas grande sea el valor de n se asocia que el flujo es dominado por distancias largas, es decir que la disipación de energía cinética tiene un rango de largas distancias, respecto al régimen donde se encuentre. Como los flujos son instantaneos la interpretación fue diferente a la hecha flujos turbulentos [106] [50], [199], [113]. Como se ajusto un coeficiente n , por cada régimen del espectro, aqui se relacionaron con maneras en las que se distribuye la energía que los nadadores le entregan al fluido (o en las que el fluido disipa la energía entregada). En ausencia de un regimen inercial, las cascadas de energía (espectros) solo se identificarón dos regímenes, uno de inyección de energía, y otro de de disipación.

Funciones de autocorrelación

Se calcularón Correlaciones $C_{uu}(\mathbf{r})$ para la velocidad del fluido en dirección $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, como el promedio del producto punto de la velocidad del fluido. Primero se calcularon correlaciones en 2D R_{uu} plano x_3 . Se uso $\Phi_{ii}(\mathbf{k}, x_3) = \mathbf{u}(\mathbf{k}, x_3) \cdot \mathbf{u}^*(\mathbf{k}, x_3)$, aplicando la transformada inversa de Fourier ecuación 4.39. El resultado son superficies 2D como se aprecia en la Figura 4-7.

Correlación para el producto punto de la velocidad. Esta se promedio sobre cada tiempo de

muestreo

$$R_{uu}(\mathbf{r}, \mathbf{x}_3, t) = \langle \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_3, t) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, \mathbf{x}_3, t) \rangle = \left(\int \mathbf{u}(\mathbf{k}, \mathbf{x}_3) \cdot \mathbf{u}^*(\mathbf{k}, \mathbf{x}_3) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right) \quad (4.39)$$

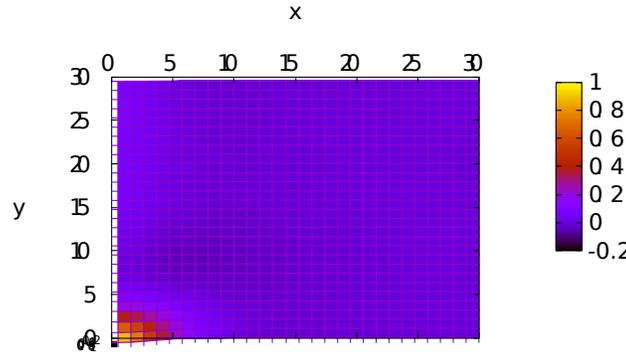


Figura 4-7: Funciones de autocorrelación $R_{uu}(\mathbf{r}, \mathbf{x}_3)$ normalizados.

Para analizar las correlaciones de forma mas sencilla, se realiza un promedio sobre la Figura 4-7 ecuación 4.40:

$$C_{uu}(r, \mathbf{x}_3) = \sum_{\mathbf{x}} \delta(\|\mathbf{x}\| - r) R_{uu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_3, t) \quad (4.40)$$

Función de autocorrelación para el fluido desde el centro de mas de los nadadores

Se calcularon funciones de auto-correlación desde el centro, debido a que se requiere conocer cual es el efecto del nadador sobre el valor de la variable continua cerca de su centro de masa. Las funciones de autocorrelaciones del fluido desde el centro de masa de los nadadores fueron calculadas en forma similar a una función de distribución radial, para cada nadador, cuyos vecinos son los nodos de la malla de las variables continuas. El radio $r = L/2$ es medido desde el centro de masa de cada nadador, de tal forma que se obtienen perfiles de las velocidad en una dimension $u_x(r_{cm} + r, \mathbf{x}_3, t)$, $u_y(r_{cm} + r, \mathbf{x}_3, t)$. Los perfiles son promediados sobre el numero de nadadores en cada plano, Figura 4-5. A partir de estos perfiles promedio (1D) se calculan las autocorrelaciones $C_{cm}(r, \mathbf{x}_3, t)$ de la velocidad del fluido. Las auto-correlaciones $C_{cm}(r, \mathbf{x}_3, t)$ se promediaron en el tiempo de muestreo.

La función de auto-correlación entre los nadadores y el fluido se definió como:

$$C_{cm}(r, \mathbf{x}_3, t) = \frac{\langle \mathbf{u}(r_{cm}, \mathbf{x}_3, t) \cdot \mathbf{u}(r_{cm} + r, \mathbf{x}_3, t) \rangle}{\mathbf{u}_{cm}(0, \mathbf{x}_3, t)^2} \quad (4.41)$$

El la tendencia positiva de una funcion de autocorelación, antes alcanzar de pasar por cero indica que hay un flujo con una misma dirección, o correlacionado. Un ejemplo de estos flujos son los jets. Cuando la función de correlación pasar por $r = 0$ hay un cambio en la dirección del flujo o un cambio en la estructura del flujo. La posición en r donde la función de auto-correlación toca el cero se llama punto de anti-correlación, que se denotara como l_{corr} . Por otro lado la longitud de correlación se obtiene mediante un ajuste con una función función exponencial, $\exp^{-(r/\xi)^2}$, donde el coeficiente ξ , es la longitud de correlación.

Correlación para la energía cinética desde el centro de masa

A partir de los perfiles de velocidad promedios, optenidos como se indico arriba, se calculó una Correlación de energía cinética en el espacio de Fourier (1D). El resultado de la correlación, se saca su parte real, se promedia sobre el ensamble de nadadores presentes en el plano x_3 equación 4.42, y sobre el tiempo de muestreo:

$$E_{\text{cm}}(\mathbf{k}, x_3) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}(\mathbf{k}, x_3) \cdot \mathbf{u}^*(\mathbf{k}, x_3) \rangle_{\text{dumb}} \quad (4.42)$$

Donde $\mathbf{u}(\mathbf{k}, x_3) = \int \mathbf{u}(\mathbf{r}_{\text{cm}}, x_3, t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\text{cm}}} d\mathbf{k}$.

Tiempo de quimiotaxis o transición

El modelo de quimiotaxis depende de una concentración umbral C_{target} el cual realiza los cambios en los modos de nado T – R o R – T, siempre y cuando la concentración local (cercana a un nadador) es superior a C_{target} . Se definio entonces un tiempo en el cual, la concentración local sea menor o igual a C_{target} . Como $C_{\text{target}} \sim \bar{C}_{\text{hom}}$ el tiempo en que tarda el ecalar $C(\mathbf{x})$ en alcanzar \bar{C}_{hom} , se denomino tiempo de transición o quimiotaxis τ_{cemo} .

Capítulo 5

Resultados

Suspensiones NI

En la Figura 5-1(a) se observa el desplazamiento cuadrático medio de los nadadores, las líneas punteadas son el régimen lineal (difusivo) que disminuye cuando la fracción volumétrica Φ de nadadores aumenta. En Figura 5-1(b) las curvas del desplazamiento cuadrático medio para los trazadores tienen un régimen difusivo que aumenta con el aumento de Φ .

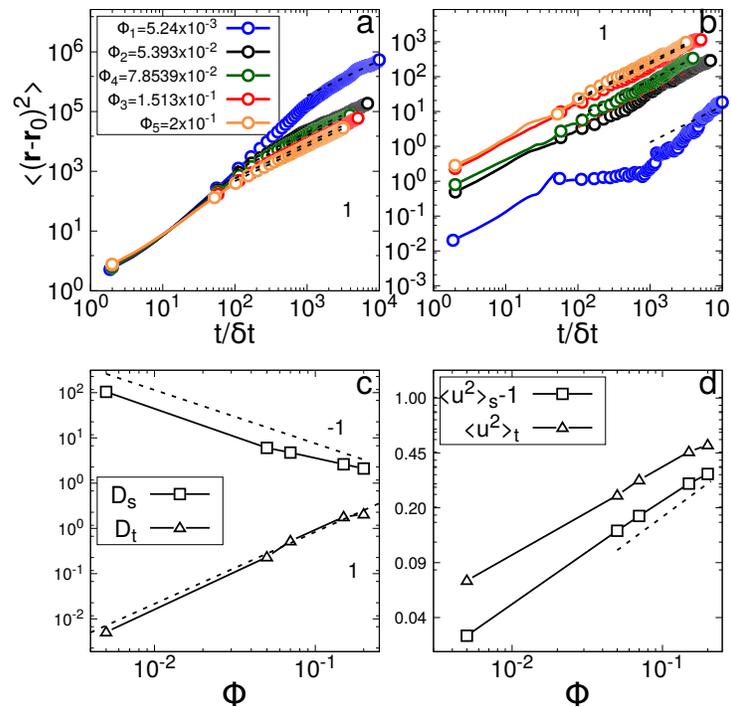


Figura 5-1: Desplazamiento cuadrático medio (a) Nadadores (b) Trazadores (c) Difusividad (d) Velocidad Cuadratica media (vmc). (\square) Nadadores (\triangle) Trazadores

La Figura 5-1(c) indica los coeficientes de movilidad de los nadadores que disminuyen en función de Φ , debido a el movimiento de un nadador se reduce por la interacción con los demas nadadores para $\Phi \sim 0,05$, esto ocurre debido a las interacciones hidrodinámicas entre ellos. En la Figura 5-1(d) se observa que el aumento de la velocidad media cuadratica de los trazadores $\langle u^2 \rangle_t$, y la de los nadadores $\langle u^2 \rangle_s$ aumenta con Φ . Es decir que en nadadores, a pesar de que su movilidad disminuye con Φ , la velocidad promedio de toda la suspensión aumenta. El aumento de $\langle u^2 \rangle_t$ y D_t es una evidencia de las interacciones hidrodinámicas en la suspensión sobre el mesdia.

Funciones de autocorrelación para la velocidad del fluido

Las correlaciones $C_{uu}(r, x_3)$ de la Figura 5-2, muestra un decaimiento de la función de autocorrelación $C_{uu}(r, x_3)$, en las posiciones $x_3 = 0,76H$, $x_3 = 0,5H$ y $x_3 = 0,0H$. En las paredes Figura 5-2(a) la correlación decae mas rapido que en $x_3 = 0,5H$ y $x_3 = 0,0H$, Figura 5-2(b-c), donde la función decae mas lento. Sin embargo al observar las tendencias de la correlación de forma mas detallada en el recuadro de la Figura 5-2(b), se puede notar que las funciones de correlación se propagan hacia la derecha a medida que aumenta Φ . Es decir a mayor numero de nadadores, los flujos con una misma dirección, como jets, tienen una mayor correlación.

En la Figura 5-2(a) la longitud de correlación ξ , obtenida por el juste, aumenta a medida que aumenta el numero de nadadores para todos los planos x_3 , los ordenes en los que aumenta la correlación son menores al tamaño del dipolo $l = 3a$ en $x_3 = 0,76H$, superiores al tamaño del dipolo en $x_3 = 0,05H$, mientras que en $x_3 = 0,0H$ tienen una tendencia casi constante excepto en $\Phi = 0,005$. En el recuadro de la Figura 5-2(c) el punto de anti-correlación l_{corr} tambien aumenta a medida que aumenta Φ , pero los ordenes de magnitud son superiores al tamaño del dipolo. Por lo tanto l_{corr} se puede entender como la distancia, superior al tamaño del dipolo l en la cual un flujo se correlaciona. Mientras que ξ puede asociarse a la longitud de correlación, inferiores o iguales al tamaño de un nadador l_{dumb} .

De el comportamiento de las longitudes de correlación se puede decir que, los flujos con una estructura similar se correlacionan a distancias mas largas que el tamaño del nadador, y se anticorrelacionan con el numero de nadadores de forma $l_{corr} \sim \Phi^{0,1413}$ en las paredes. Mientras que las longitudes de correlación se comportan como $\xi \sim \Phi^{0,095}$ en las paredes. Esto significa que los flujos a largas distancias estan mas correlacionados que flujos acortas distancias. En cuanto al efecto de las paredes las correlaciones aumentan con Φ en potencias menores a las obtenidas en en las paredes.

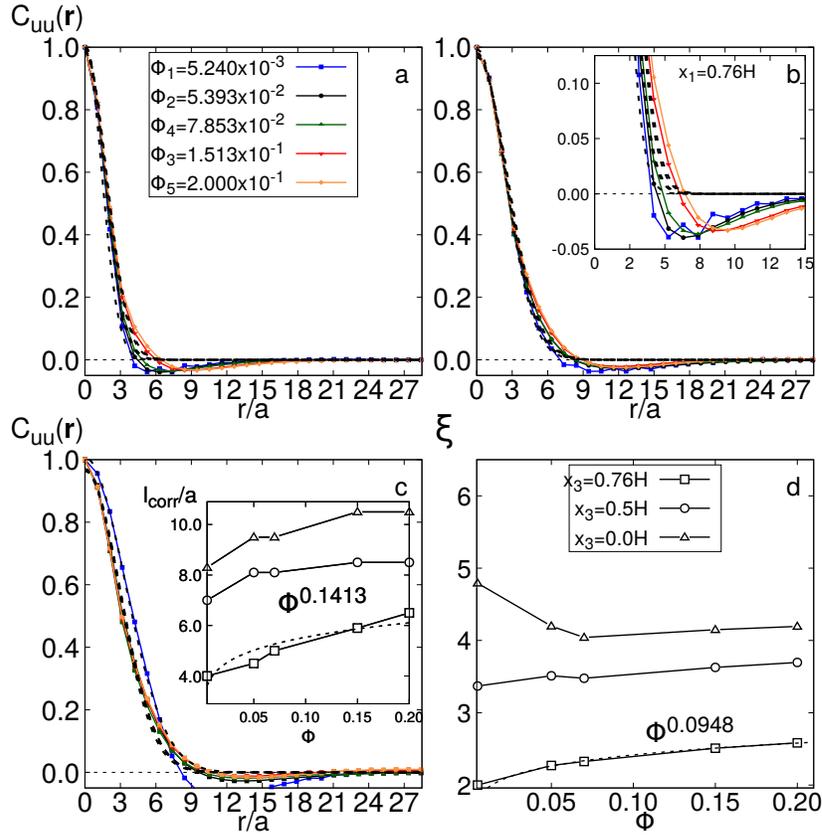


Figura 5-2: Función de autocorrelación para la velocidad del fluido, en planos (a) $x_3 = 0,76H$ (b) $x_3 = 0,5H$ (c) $x_3 = 0,0H$. Longitud de correlación ξ (d). Recuadro (b) detalle funciones de anticorrelación en la pared $x_3 = 0,76H$. Recuadro (c) Primer cero de la función de autocorrelación ó punto de anti-correlación l_{corr} . Las líneas punteas en (d) y el recuadro (c) son funciones de forma $\sim \phi^n$

Para ilustrar mejor el concepto de las longitudes de correlación y puntos de anticorrelación, se usara la Figura 5-3. En esta figura se observa que la dirección de los campos de velocidad cambian menos, o en distancias mas largas en el centro del canal ($x_3 = 0,0H$), que cercanos a las paredes ($x_3 = 0,76H$). Esto significa que las paredes y el numero de nadadores deflectan el flujo generado por las interacciones hidrodinámicas. Las direcciones de nado aleatorias de los nadadores cerca de las paredes generan flujos caoticos [32], [116], [48]. Lo anterior quiere decir que, en las paredes los flujos tienden a cambiar de estructura (jet-vortice) en distancias mas cortas que en los otros planos, donde los cambios entre jets y vortices necesitan mayor longitud.

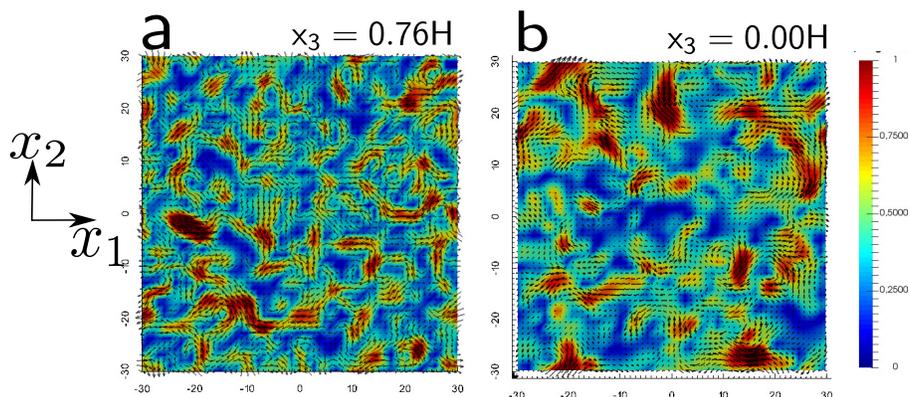


Figura 5-3: Campo de velocidades para $\Phi = 0,2$ en (a) la pared (b) el centro del canal.

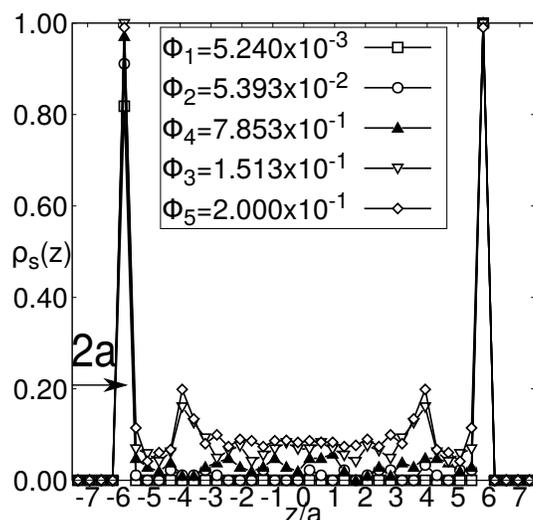


Figura 5-4: Distribución de nadadores en el canal, normalizada sobre el número máximo de nadadores.

Densidad de nadadores en el canal

En la Figura 5-4 los nadadores tienden a acumularse en las paredes y a medida que aumenta la cantidad de nadadores tienden formar varias capas, bicapas en el caso de $\Phi \geq 0,1$, por efectos estéricos e hidrodinámicos. En bajas fracciones volumétricas, todos los nadadores se ubicaron en las paredes generando un mínimo en el conteo de nadadores. El efecto de la hidrodinámica en el dipolo de fuerzas induce a que el dipolo sea atraído hacia las paredes, estos resultados son consistentes con los presentados por [32] [87], [66]. En el centro del canal la distribución aparentemente homogénea, significa que no hay una orientación de los nadadores. Como muestra la ecuación 4.7 la distancia mínima entre los beads de cada nadador

y las paredes es mayor a $1,5a$ como lo muestra la distribución de densidades, respetando la física de volúmen de exclusion entre los bads y el nadador.

Cascadas (espectros) de Energía

En los espectros de energía, $E(k, x_3)$, Figura 5-5(a), se identificaron dos regímenes de energía disipada que son separados por un cambio en la pendiente. Tomando como base el plano $x_3 = 0,76H$ (pared) Figura 5-5(a), el primer régimen es el de inyección, se ubicó en bajas frecuencias cuyo intervalo es k $0,3 < k < 1,102$, como lo indica la flecha negra, las longitudes asociadas a este intervalo son $5,7a < L < 20,0a$. La pendiente se ajusta con $E(k) = E_{k\alpha} k^{-\alpha}$. El segundo régimen es el de disipación y se ubicó en altas frecuencias $1,99 < k < 2,329$ cuyas longitudes son $2,3a < L < 3,49a$. El régimen disipativo se escala con una pendiente que sigue $E(k) = E_{k\eta} k^{-\eta}$. En este régimen se aprecia un pico ubicado en $k \sim 2,85$, como lo indica la flecha vertical roja de la Figura 5-5(a) en $x_3 = 0,76H$ o en mas detalle en el recuadro de $x_3 = 0,50H$. La frecuencia en este pico se asocia con una longitud del orden de $l \sim 2,2a$ relacionada con el diametro del bead $\sim 2a$. Es en uno de los beads donde actua la fuerza del flagelo de manera constante, [200]. El intervalo de las frecuencias del régimen de inyección, esta asociado a longitudes superiores al tamaño del canal $2H < 20a$, y superiores a el tamaño de un nadador $l_{dumb} < 5,7a$, es decir que este régimen se relaciona con la taza de disipación de energía en largas distancias. Las frecuencias ubicados en el régimen disipativo, son del orden del tamaño del dipolo l_{corr} hasta el tamaño de cada bead a , por lo que se asocia con la energía disipada en cortas distancias. En los espectros de energía el valor de las pendientes se asoció con la velocidad de disipación, por lo tanto la relación $E(k, x_3) \sim l^\eta$ disipa energía mas rapido que $E(k, x_3) \sim l^\alpha$, si $\eta > \alpha$. Para caracterizar el comportamiento de los espectros, se graficaron los valores de α , η Figura 5-5(b) y $E_{k\alpha}$, $E_{k\eta}$ Figura 5-5(c) en función de Φ . Las pendientes α , de los espectros, aumentan con un orden $\sim \Phi^{0,2136}$ cerca de las paredes, pero en el centro del canal α no cambia respecto a Φ Figura 5-5(b), esto significa que en $x_3 = 0,50H$ y $x_3 = 0,0H$ los flujos disipan energía de forma mas rapida y constante que en las paredes, para todo Φ . Las paredes disminuyen la velocidad de disipación, pero el aumento de Φ incrementa la velocidad de disipación, una característica de movimientos colectivos [108], [109], [110], [48], [200]. Para η , el cambio respecto a numero de nadadores sigue $\sim \Phi^{-0,0166}$, la velocidad de disipación disminuye muy lento en pequeñas escalas, e indica que es casi constante desde todo Φ . En $x_3 = 0,50H$ y $x_3 = 0,0H$ siguen una tendencia casi constante. Es decir que en bajas frecuencias la disipación de energía es muy rapida, pero su velocidad es constante respecto al numero de nadadores y a la ubicación en el canal. Los coeficientes $E_{k\alpha}$ y $E_{k\eta}$ Figura 5-5(c) indican que hay una mayor cantidad de energía entregada al aumentar Φ para largas y cortas distancias. Para ambas cantidades la energía entregada de los nadadores al fluido aumenta de forma monotonamente creciente en $x_3 = 0,5H$ y $x_3 = 0,0H$, en las paredes tiene un comportamiento asimotico $\Phi^{0,3918}$ mientras que $\Phi^{0,6899}$ es creciente. Esta diferencia indica que la energía a cortas distancias aumenta

por la cercanía de los nadadores, mientras que en largas distancias podría relacionarse con el tamaño del sistema.

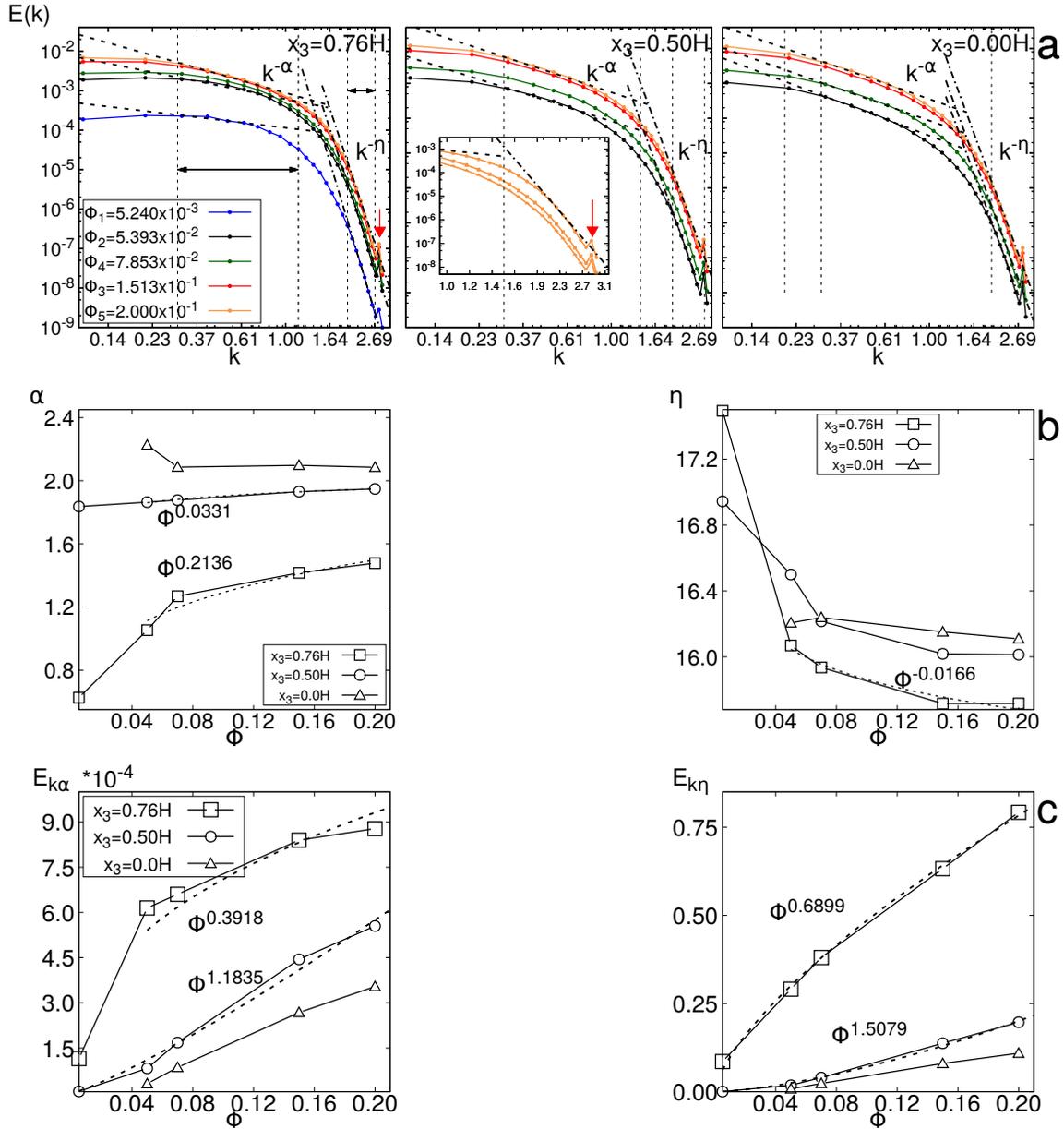


Figura 5-5: (a) Espectro de energía cinética para el fluido medidos en planos ubicados en $x_3 = 0,76H$, $x_3 = 0,5H$, $x_3 = 0,0$. La líneas punteadas horizontales són los números de fourier a los cuales la energía se escala como: $E(\mathbf{k}) = k^{-\alpha}$ y $E(\mathbf{k}) = k^{-\eta}$ que són las líneas punteadas. (b) Exponentes α y η de los números de Fourier (pendientes de os régimenes de inyección y disipativo) en función de Φ y (c) Coeficientes $E_{k\alpha}$ y $E_{k\eta}$ en función Φ .

En resumen en cortas distancias (altas frecuencias) la energía disipada aumenta monotonamente con Φ pero la velocidad de disipación es mas lenta, en largas distancias los nadadores incrementan asintotiacamente energía disipada con Φ y la velocidad de disipación aumenta. Esto quiere decir que en cortas distancias hay una tendencia a acumular energía que se disipa muy lentamente. En largas distancias el aumento y la velocidad de disipación (en dicha escala) significa que la disipación de energía es dominada por flujos en largas distancias. Las paredes deflectan el flujo y causan un aumento en ña cantidad de energía disipada, pero reducen la velocidad o tasa de disipación en largas distancias, en cambio los planos ubicados lejos de las paredes hay menos energía disipada pero la tasa de disipación es mas alta. En otras palabras en las paredes se presenta una acumulación de flujos con una alta energía cinética que favorece la mezcla de sustancias químicas.

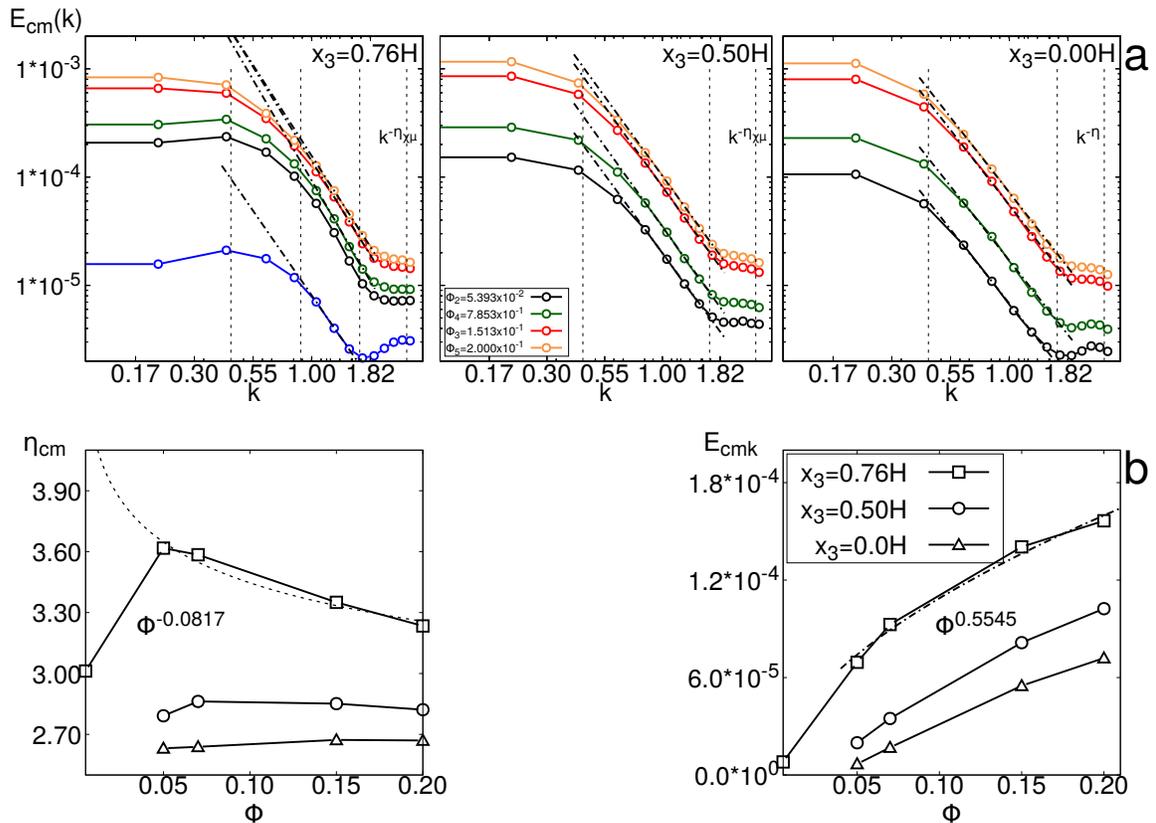


Figura 5-6: (a) Función Espectro de energía para el fluido desde el centro de masa cada nadador medidos en planos ubicados en $x_3 = 0,76H, x_3 = 0,5H, x_3 = 0,0$. La líneas horizontales són los números de fourier para los cuales la energía se escala como: $E_{cm}(k) = k^{-\eta}$. (b) Coeficientes de ajuste de las curvas $\sim E_{kcm}k^{\eta_{cm}}$.

Correlaciones de Energía cinética desde el cm

En régimen se escalo como $E_{cm}(k, x_3) = E_{cmk} k^{-\eta}$. Se identifico un régimen entre $0,439 < k < 1,98$ cuya longitud fue del orden de a y H ($2,174 < L < 7,15$). Entre $1,98 < k < 2,98$ hay una región que tiene una tendencia constante y que se puede asociar al tamaño del dipolo l y del bead a , que entrega energía de manera constante al fluido, mediante la fuerza del flagelo f^{fl} , esta observación es similar al reportado por [200]. La tendencia de la curva para $\Phi = 0,005$ (Curva azul), en $x_3 = 0,76H$, tiene un pico que aumenta en $k > 1,98$. En este punto es mas evidente la entrega o disipación de energía realizada por un solo nadador. Por otro lado los efectos colectivos se observan en $k < 1,80$, pero son mínimos comparados con las otras curvas, por el numero de nadadores.

En los demas planos $x_3 = 0,50H$ y $x_3 = 0,00H$, no se calcularon los espectros para fracciones $\Phi = 0,005$, ya que, como se evidencio en la Figura 5-4, todos los nadadores estan en las paredes.

Los coeficientes, pendientes η_{cm} , Figura 5-6(a), son menores a los reportados por la Figura 5-5, indica que la deisipación promedio desde el cm de los nadadores es mas rapida en las paredes y es mas lenta, casi constante en $x_3 = 0,00H$ y $x_3 = 0,50H$. Sin embargo e igual que en La Figura 5-5 (b) hay una disminución de la velocidad de disipación promedio respecto a Φ , en un orden similar al de η . El valor del coeficiente $E_{k\eta_{cm}}$ Figura 5-7(b) aumenta de forma asintotica con el aumento de Φ , pero el orden es muy bajo como en largas distancias similar a $E_{k\alpha}$. En resumen desde el centro de masa la cantidad de energía disipata aumenta con Φ pero la velocidad de disipación en las paredes disminuye con Φ , lo que significa que el régimen que captura esta correlación es el disipativo. La rapidez de la disipación de energía decae lentamente pero la tendencia en la cantidad de energía disipada suigiere que la energía cinética disipada esta contenida en flujos de lrgas distancias, superiores a la distancia del dipolo.

Funciones de autocorrelación del fluido desde el cm

En la Figura 5-7 la correlación para el flujo $C_{cm}(r)$ desde el centro de masa, tubo un comportamiento similar al de la Figura 5-2.

Se calcularon las distancias de correlación ξ_{cm} y $l_{corr_{cm}}$ en forma similar a las de la Figura 5-7. Las tendencias de la longitudes de correlación ξ_{cm} siguio una tendencia asintotica, con una ley de potencias del orden de $\Phi^{0,1114}$, similar a la de la Figura 5-2(d). Esto significa que las distancias de correlación ξ_{cm} y ξ brindan información reelevante sobre flujos en cortas distancias. Respecto a la posición en los diferentes planos x_3 , las paredes aumentan la anticorrelación del flujo cuando aumenta Φ . La explicación de las distancias de correlación del centro de masa, son entonces, las mismas que hechas en párrafos anteriores. Las paredes deflectan el flujo generado por los nadadores, haciendo que las distancias de correlación sean menores.

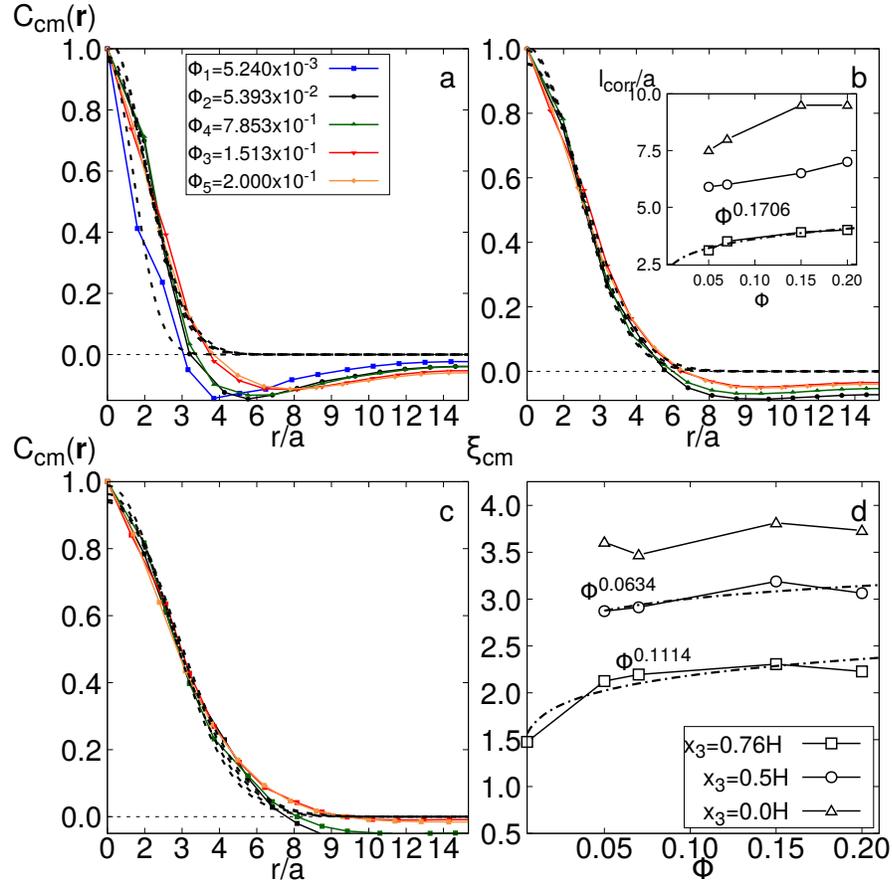


Figura 5-7: Función de autocorrelación desde el centro de masa del dipolo, para la velocidad del fluido en (a) $x_3 = 0,76H$ (b) $x_3 = 0,5H$ (c) $x_3 = 0,0H$, el recuadro es el primer cero de la función, (d) Logntiud de correlación calculada usando una función exponencial $\exp^{-(r_{cm}/\xi_{cm})^2}$.

El punto de anti-correlación l_{corr} , al igual que en la Figura 5-2 aumenta en cada plano, en las paredes aumenta como $\Phi^{0,1706}$ lo que refuerza la idea de que en ausencia de nadadores o superficies solidas los flujos, independiente de la magnitud de su velocidad, conservan su dirección en largas distancias.

Función de distribución radial

El comportamiento de la función de distribución radial en cada uno de los planos medidos, es similar al comportamiento de un gas activo [9], [62] Figuras 5-8. No hay presencia de formación de agregados. Para distancias menores al tamaño del nadador l_{dumb} se presentan dos picos, unos cercanos a una distancia dos veces el radio de la pepa del nadador (flecha negra), que se debe al volumen excluido del potencial de Gay-berne, mientras que el otro se encuentra en distancias superiores al tamaño del dipolo l y se deben a las interacciones

hidrodinamicas entre los nadadores (Flecha roja).

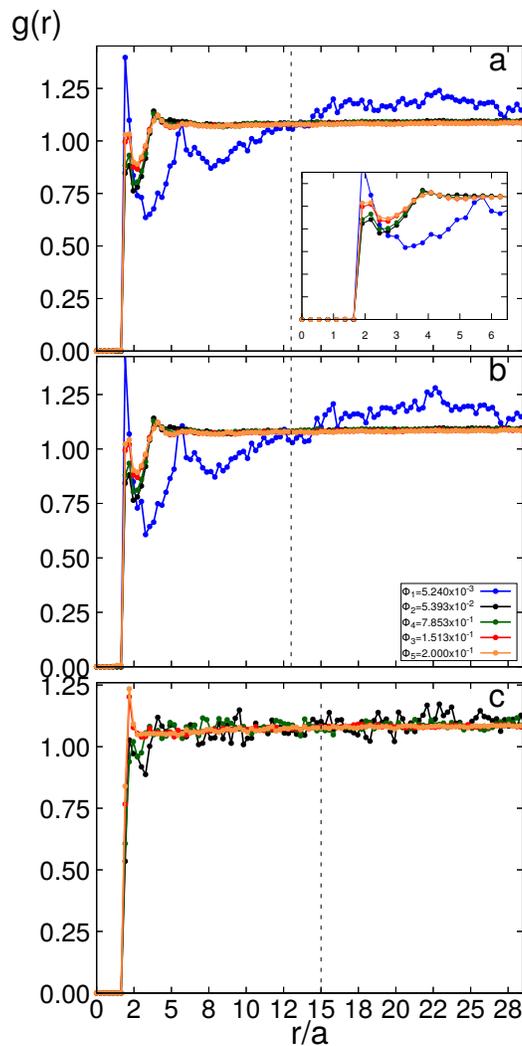


Figura 5-8: Función de distribución radial $g(r)$ en planos ubicados en (a) $x_3 = 0,76H$ (b) $x_3 = 0,5H$ (c) $x_3 = 0,0H$. Las funciones se vuelven constantes a partir de $r/a > 12$ para $\Phi \geq 0,05$.

Para bajas Φ se observa un pico mayor, y se debe a la alineación entre dipolos por efectos estéricos. Al aumentar el número de nadadores aumenta las interacciones hidrodinámicas que son de largo alcance. La forma de la curva es muy similar a la de un gas activo [82], [9] [89], [66]. El segundo pico, se puede relacionar con los nadadores vecinos que tienen una distancia característica de $r/a \sim 4$ (para $\Phi > 0,053668$) o $r/a \sim 5$. En el centro del canal la curva solo tiene un pico debido a las interacciones estéricas y a la acumulación de nadadores en las

paredes.

La dinámica de la suspensión, específicamente la movilidad de trazadores D_t , incrementó de forma lineal respecto a Φ , mientras que la movilidad de los nadadores D_s sufrió un decaimiento monotono respecto a Φ , estos resultados fueron similares a los obtenidos por [32], [6], [14], [48], para pushers. El aumento lineal de la movilidad del fluido respecto a Φ , es una evidencia de que las interacciones hidrodinámicas generadas por los nadadores son las que controlan la suspensión. Por otro lado, aunque se encontró una tendencia monótona creciente de $\langle u^2 \rangle_t$ y $\langle u^2 \rangle_s - 1$, no se encontró una relación lineal entre estos valores y la cantidad de nadadores Φ como si lo encontró [32], [6], [14], [48]. Si bien al aumento de $\langle u^2 \rangle_t$ y $\langle u^2 \rangle_s - 1$ es un efecto directo de las interacciones hidrodinámicas, es posible que el periodo del canal, que es mayor que el de [32], sea responsable del comportamiento amortiguado de $\langle u^2 \rangle_s - 1$ respecto a la Φ .

La acumulación de los nadadores en las paredes, es consistente con los resultados previos presentados por [87], [32], [89], [83], por lo anterior la acumulación de dipolos en las paredes es un efecto hidrodinámico, que induce a la atracción de nadadores a superficies sólidas.

Las longitudes de correlación ξ y ξ_{cm} aumentaron en términos de ley de potencias con Φ como $\sim \Phi^{0,1}$, en las paredes. El aumento monotono de las longitudes de correlación fue similar a lo reportado por [48], [6] y experimentalmente por [86], [24], confirmando que los flujos generados por los nadadores sufren una correlación y decorrelación, es decir cambios de estructuras del flujo en función de la cantidad de nadadores. A corde a los resultados presentados en la Figura 5-4, las longitudes aumentan si hay flujos con una misma dirección (o estructura) si estos se conservan en longitudes más largas que el tamaño del dumbell, esto ocurre en planos donde la densidad de nadadores es más baja como en el centro del canal. Flujos con una misma dirección o correlacionados se midieron con los puntos l_{corr} , e indicaron que hay una mayor anticorrelación de flujos en zonas donde la densidad de nadadores es muy alta. En planos alejados del canal, donde las paredes no afectan el flujo, las longitudes son más largas no solo por la ausencia de nadadores si no por la naturaleza del fluido que es lineal. La presencia de muchos cambios en la estructura del flujo se asocia con el movimiento caótico de nadadores sin ninguna dirección u organización particular. Esto lo corroboran las curvas de la $g(r, x_3)$, que revelan que los nadadores están aleatoriamente distribuidas, no hay una estructura definida especialmente sobre las paredes. Finalmente la suspensión NI se comportó de manera similar a un gas activo, que tiene un número de vecinos constantes en largas distancias, similar a las curvas de [9], [201].

El sistema es controlado por los flujos generados por los nadadores, los espectros de energía disipativa en el fluido y el ajuste con los coeficientes y pendientes $E \sim k^{-n} \sim l^n$ o $E \sim k^{-n} \sim l^\alpha$, reveló que la naturaleza de estos flujos son de largo alcance. En cortas distancias hay una

tendencia a acumular energía cuya velocidad de disipación es lenta. Por otro lado en largas distancias los flujos disipan mayor cantidad de energía y la velocidad de disipación amentó con el incremento de Φ . Esto significa que el sistema es controlado por flujos en largas distancias. Resultados similares fueron obtenidos por [6], [14], [48], [202], [200]. Respecto al centro de masa se encontro un resultado similar al de [202], donde se confirma la acumulación de energía cinética en frecuencias intermedias, entre $l = 3a$ y $l_{\text{dumb}} = 5a$. resultados similares se encontraron para $E_{\text{cm}}(\mathbf{k}, x_3)$.

Resultados Quimiotaxis

En esta sección se compararon los resultados obtenidos en la sección anterior con los principales resultados de suspensiones intractuantes RT, TR y suspensiones Prob.

Como se mencionó en el capítulo anterior se utilizaron dos distribuciones iniciales de concentración de una sustancia quimioattractora (escalar $C(\mathbf{x})$).

Todos los resultados de suspensiones NI se compararon contra los resultados de suspensiones interactuantes con una concentración $C(\mathbf{x})$ inicial fue la (I). Se realizo una comparación inicial usando las funciones de distribución radial y espectros de energía cinética.

Se dividió el capítulo en tres secciones, una sección para comparar las suspensiones RT con suspensiones NI, una para comparar suspensiones TR con suspensiones NI y probabilidad Prob y una sección para comparar los efectos de las condiciones iniciales en RT y TR.

Comparación usando la función de distribución radial

En la Figura 5-9 la curva $g(r, x_3)$ calculada en cada plano, muestra una diferencia entre las suspensiones TR, RT, Prob y NI respecto a la distancia de los vecinos de cada suspensión, para dos de las 5 Φ usadas. En el sistema TR a $\Phi = 0,2$ y a $\Phi = 0,078539$, Figura 5-9 (a),(c), se evidencia que hay una estructura en la distribución del numero de vecinos en cada plano. Las líneas punteadas verticales indican las distancias en las cuales cambia la estructura de la suspensión. En la Figura 5-9(a) las líneas están ubicadas en distancias características del sistema $r \sim 2a$, $r = 5a$ y $r \sim 2H$, siendo esta última la que se repite en cada plano. La cantidad de vecinos aumenta en el plano $x_3 = 0,76H$, debido a que los nadadores se acumulan en las paredes. En cada una de las curvas $g(r, x_3)$ de la Figura 5-9 (a), se aprecia que $r \sim 2H \sim 15a$ es un punto de intersección entre las curvas de una suspensión NI y curvas de sistemas TR. El decrecimiento de la curva en este punto indica que a distancias menores que el tamaño del canal los nadadores se acumulan. El decrecimiento de la curva y los picos ubicados a partir de $r \sim 2a$, sugieren que hay una agregación de nadadores. En las paredes $x_3 = 0,76H$ se observa que existe una estructura en el empaquetamiento u orientación de dipolos, y a medida que se aleja de la superficie la estructura desaparece, aunque persiste la agregación.

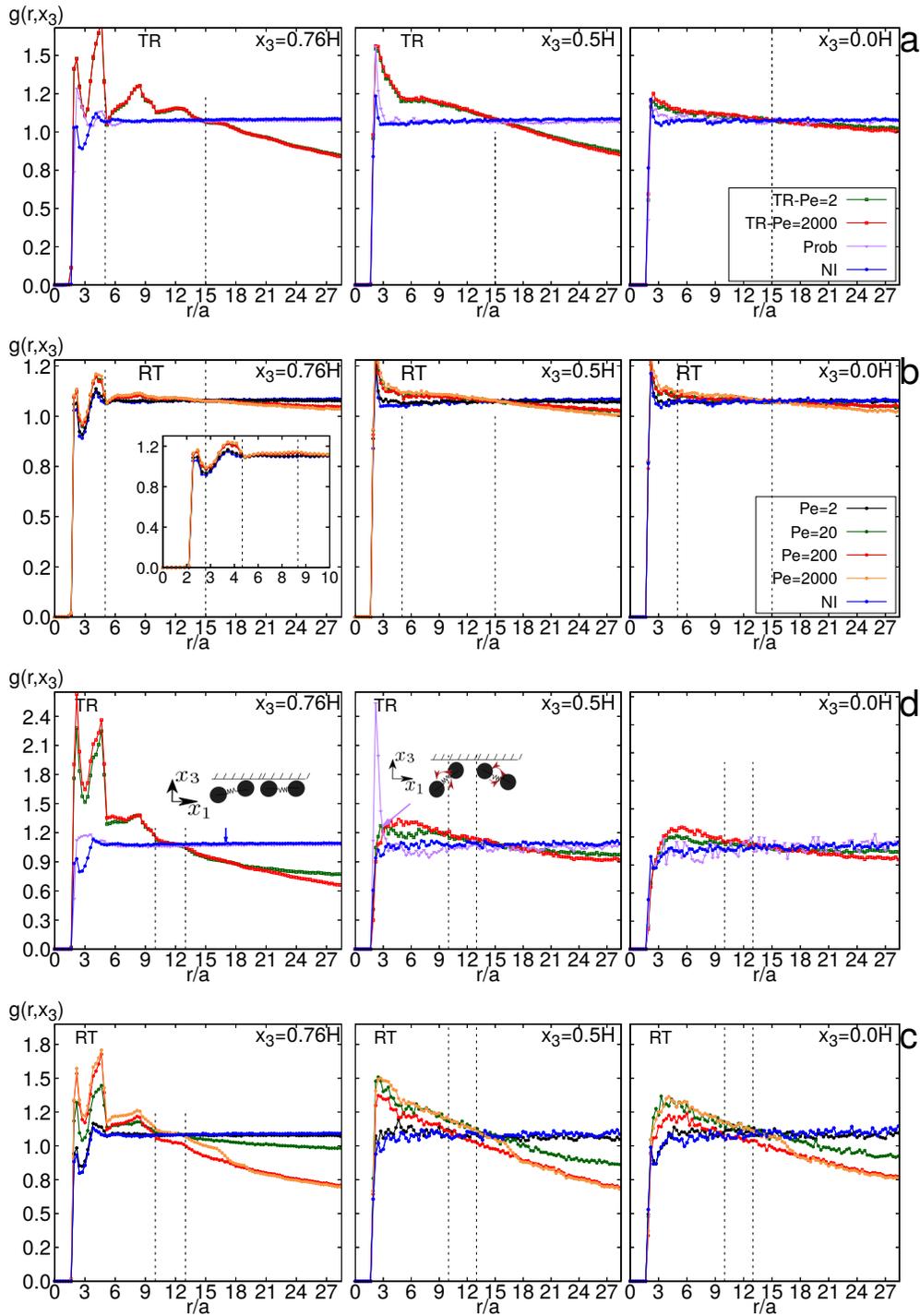


Figura 5-9: Función de distribución radial para nadadores en diferentes posiciones del canal x_3 . (a) Suspensión TR a $\Phi = 0,2$, (b) suspensión RT a $\Phi = 0,2$ (c) Suspensión TR a $\Phi = 0,078539$ (d) suspensión RT a $\Phi = 0,078539$. La condición inicial del escalar es la condición (I).

En la Figura 5-9 (c) $\Phi = 0,078539$ los puntos de intersección se ubican en $r \sim 12a$, para distancias menores a estos puntos hay una agregación de nadadores con una estructura diferente a de la Figura 5-9 (a). Prueba de esto, son las curvas en los planos $x_3 = 0,50H$ y $x_{e3} = 0,00H$ donde no se observa los picos de Figura 5-9 (a). Como en las curvas NI y Prob estan distribuidas aleatoriamente para largas distancias se concluye que la agregación es un producto de la quimiotaxis impuesta en el modelo. Las suspensiones Prob (curva purupra), Figura 5-9(a),(c), se comporto como un gas activo en largas distancias, los nadadores tienen una alta frecuencia de rotación (*Tumbling*) que induce a la separación desde las paredes como lo muestra la imagen de la Figura 5-9(c).

Es decir que el sistema Prob no genera una alineación con las paredes, Contrario a los que pasa con un sistema NI que si presenta una alineación con las paredes, y en ambos no se presento una agregación en cortas distancias. Este comportamiento en el sistema Prob tiende a repetirse para sistemas RT Figura 5-9(a), lejos de las paredes. Esto significa que la agregación de nadadores lejos de las paredes, se compone de *Tumblers* (dipolos que realizan *Tumbling*) y carece de una estructura definida.

El efecto del valor del numero de Peclet en sistemas TR (curva roja y verde) Figura 5-9(a),(c), no presenta un cambio significativo sobre el comportamiento de las curvas $g(r, x_3)$. Esto significa que la variación de la difusividad del escalar no afecta el comportamiento de la suspensión si su modo de nado es TR [66].

En los sistemas RT, Figura 5-9(b)(d), el efecto del Pe en la suspensión se refleja en el aumento de la agregación de nadadores, esto se aprecia mejor en el recuadro de la Figura 5-9(d), en $x_3 = 0,76H$. Un sistema RT depende de la difusividad para generar o no una agregación de dipolos. Un punto representativo es la suspensión $R - T$ para una concentración cuya difusividad cumple $Pe = 2000$. Al comparara las Figuras 5-9(b-d) para $\Phi = 0,2$ y $Pe = 2000$ se advierte que a medida que Φ aumenta la agregación, o la estructura del empaquetamiento disminuye y tiende a ser muy similar al de suspensiones NI. Es decir que la suspensión RT depende fuertemente del numero de nadadores para que la estructura sea mas notoria. Como la $g(r, x_3)$ se calculo como en cada uno de los muestreos y se promedio, la estructuras de los picos en cada una de las graficas sugiere que el agregado esta perdurando en el tiempo para sistemas TR y sistemas RT, estos ultimos en bajas concentraciones. La ubicación de las líneas punteadas en las Figuras 5-9(b)(d), indican que el agrgado o la cantidad de vecinos disminuye para distancias equivalentes al tamaño del canal.

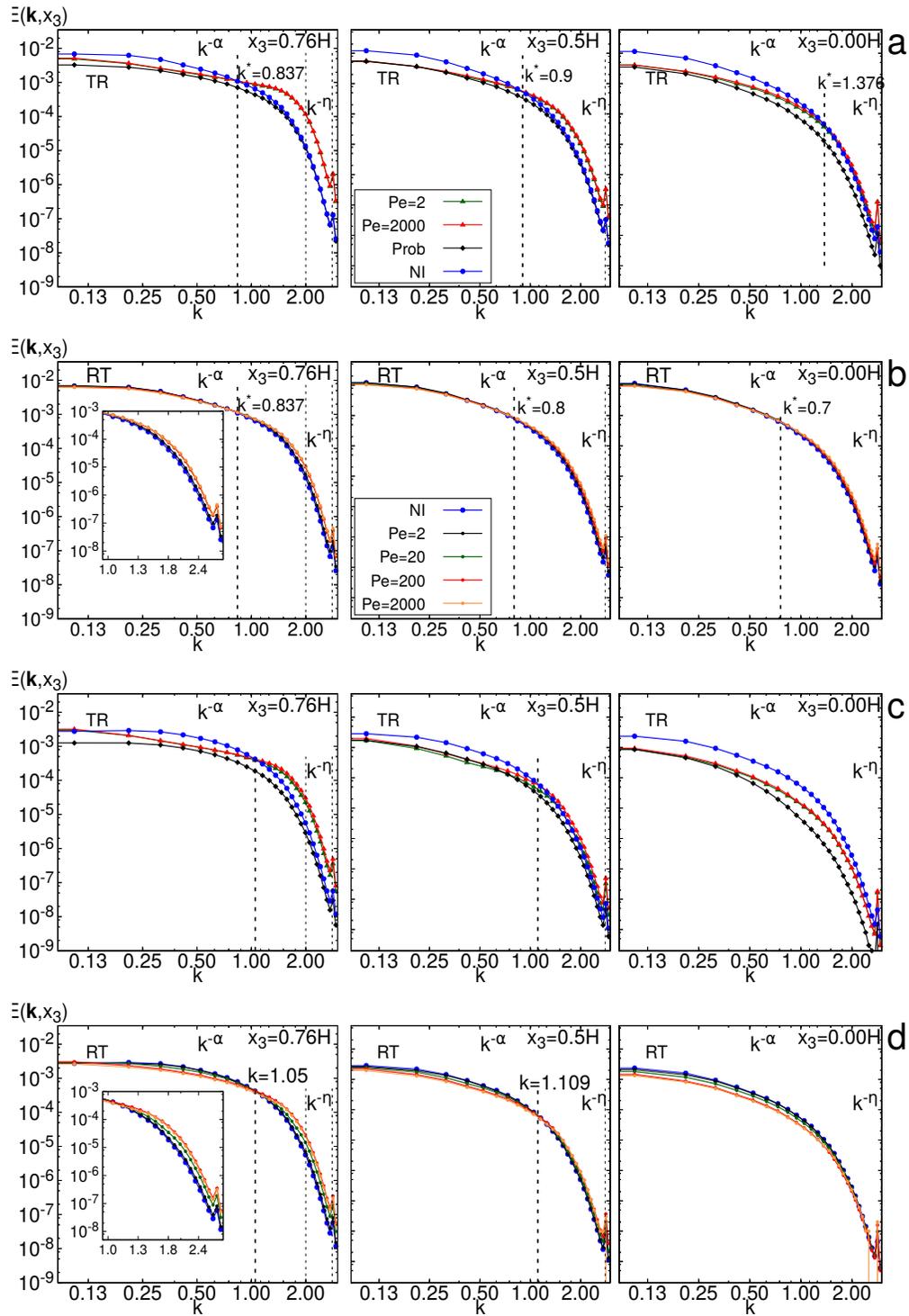


Figura 5-10: Espectro de energía cinética para el fluido, para diferentes ubicaciones en el canal x_3 . (a) TR a $\Phi = 0,2$ (b) RT a $\Phi = 0,2$ (c) TR a $\Phi = 0,078539$ (d) RT a $\Phi = 0,078539$. Las líneas punteadas indican los puntos de intersección de las curvas RT con las curvas de suspensiones NI.

Comparación usando las cascadas de energía cinética

La Figura 5-10 muestra la diferencia en el perfil de las cascadas de energía disipada, entre las suspensiones NI, TR, RT y Prob. En los casos TR y RT se aprecian dos regímenes, en forma similar a los encontrados en espectros de suspensiones NI en la sección anterior. Los espectros de energía de suspensiones con quimiotaxis, en ambos casos RT y TR presentan un disipativo en frecuencias del orden $2,09 < k < 2,890$, mientras que el régimen de inyección se caracterizo para frecuencias $0,415 < k < 1,152$.

En suspensiones TR, Figura 5-10(a) y Figura 5-10(c), se aprecia que existe un frente o una tendencia del espectro en altas frecuencias donde la energía disipada tiende a ser mas alta, en casi un orden de magnitud comparadas con sistemas Prob y sistemas NI. Por otro lado se presenta una disminución de el valor de $E(k)$ de respecto a suspensiones NI para bajas frecuencias. Es decir que para ambas condiciones $\Phi = 0,078539$ y $\Phi = 0,2$ los flujos en largas distancias de sistemas TR son bajos y disipan muy poca energía.

Tomando en cuenta el resultado presentado Figura 5-9 (a),(c) y la tendencia de los espectros de energía en largas y cortas escalas, la formación de agregados es la responsable del aumento de energía en altas frecuencias y la disminución del espectro de energía en largas distancias. Mientras que en suspensiones Prob la rotación de dipolos o *Tumblers* generan flujos de baja velocidad respecto a sistemas NI y sistemas interactuantes, por lo tanto los flujos en largas y cortas distancias disipan mucha menos energía.

En las Figuras 5-10 (a)(c) se indica el punto donde se cruzan los expectros de suspensiones TR con sistemas NI. Para $\Phi = 0,2$ la intersección de ubica en frecuencias $k \sim 0,837$ cerca de las paredes $x_3 = 0,76H$, estos puntos estan asociados a longitudes $l \sim 7,5 \sim H$. A media que se alejan de las paredes $x_3 = 0,50H$ las frecuencias aumentan $k \sim 0,9$ con distancias $l \sim 5$, mientras que $x_3 = 0,0H$ $k \sim 1,37$ es y la distancia es $l \sim 4,5$. Para $\Phi = 0,078539$ Figura 5-10 (c) los puntos de intersección se ubican en frecuencias mas altas. Lo anterior quiere decir que son las distancias mínimas donde la agregación de nadadores empieza a disipar energía a tazas mayores que la de sistemas sin quimiotaxis, y puede existir una relación entre el punto de intersección y el tamaño del agregado. Por otro lado, la disipación disminuye respecto a la posición x_3 , esto se debe a que la agregación de *Tumblers*, que como se explico en sistemas Prob generan flujos muy bajos.

El efecto del Pe sobre el comportamiento de suspensiones TR, al igual que en la Figura 5-10(a)(c), indica que la suspensión tiende a agregarse independiente del valor de Pe de la sustancia quimioattractora. Esta observación verifica lo que ocurre en las $g(r, x_3)$.

Los espectros de suspensiones RT, Figura 5-10(b)(d), tienen una clara dependencia en el valor del Pe , a medida que aumenta el Pe la disipación de energía en bajas frecuencias aumenta, sin embargo con el aumento de Φ es menos notorio el aumento de la taza de disipación en bajas frecuencias.

En largas distancias las suspensiones RT presentan espectros cuya tendencia es similar al

de una suspensión NI, lo que quiere decir es que la agregación en sistemas RT es mas pobre o inferior comparada con sistemas TR. Para $\Phi = 0,078539$ de una suspensión a $Pe = 2000$, Figura 5-10(d), el espectro tiende a comportarse mas como el perteniente a una suspensión TR, tambien se puede notar que el frente espectral de energía disipada, en el régimen disipativo (altas frecuencias), aumenta a medida que aumenta el Pe . La observación anterior indica que en sistemas RT hay una competencia entre Φ y Pe , Φ se puede relacionar directamente con las interacciones hidrodinámicas y Pe con la quimiotaxis en este modelo.

En la Figura 5-11, se resume el efecto de la quimiotaxis y las probabilidades impuestas en suspensiones de nadadores a $\Phi = 0,078539$, ademas de dar una mayor claridad a los resultados obtenidos en las Figuras 5-10 y Figuras 5-9. En ambas suspensiones RT y TR, Figura 5-11(c-d), se observa un campo de velocidades asociado a la agregación de dipolos (nadadores) que genera velocidades muy altas en cortas distancias.

En largas distancias las velocidades son muy bajas y esto coincide con los resultados anteriores. En suspensiones Prob Figura 5-11(b), las velocidades son mas bajas comparadas con suspensiones NI Figura 5-11(a). Por lo tanto la ausencia de un efecto direccionador, de naturaleza colectiva, como la quimiotaxis los nadadores con altas frecuencias de *Tumbling* no tienden a agregarse, y al rotar los nadadores no pueden alinearse con las paredes.

Conclusiones preliminares:

Las curvas de la $g(r, x_3)$ Figura 5-9 indican que hay una agregación de nadadores, cerca de las paredes las cruvas para ambos sitsemas TR y RT las curvas sugieren que hay una agregación con una estructura ordenada. La tendencia de estas curvas debido a la agrgegación de partículas o coloides activos se pueden corroborar en investigaciones previas, en dichas investigaciones del decaimiento de la función y la presencia de picos indica no solo la formación de agregados si no tambien la formación de estructuras ordenadas [17], [203], [74] [66], [202]. La agregación se manifiesta como el aumento de los campos de velocidad en cortas distancias. Los espectros de energía son acordes a esta observación anterior, la agregación de *Tumblers* genera campos de velocidad muy bajos en largas distancias y muy altos sin estrcutura en cortas distancias. En las paredes, la formación de agregados quiza con una estructura particular, disipan energía en cortas distancias con mayores ordenes de magnitud que otros sistemas sin quimiotaxis, posiblemente por el aumento de las fuerzas de repulsión entre nadadores y la pared.

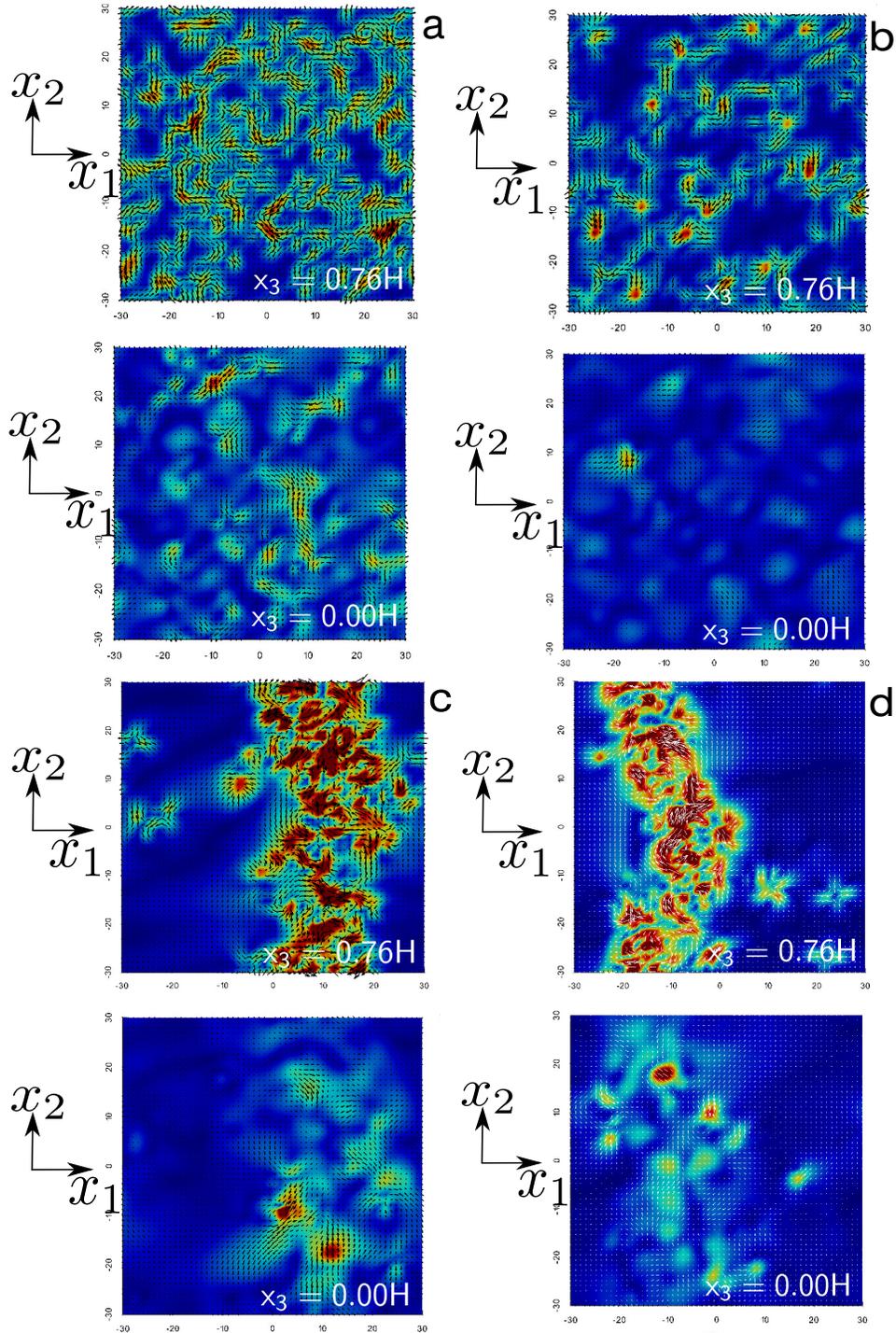


Figura 5-11: Campos de velocidad característicos, en un tiempo $t/\delta t_a = 1000$ para los diferentes tipos de suspensión usados a $\Phi = 0,078539$ en dos de los planos de medición. (a) Suspensión NI (b) suspensión Prob (c) suspensión RT $Pe = 2000$ (d), suspensión TR $Pe = 2000$.

Las frecuencias en las cuales los espectros de los sistemas interactuantes se encontraron con sistemas NI, se relacionan con distancias característica del sistema y son superiores al tamaño de un nadador, a su vez esta información se puede relacionar con el tamaño del agregado. El efecto del Pe sobre la agregación de nadadores y su duración es dependiente para suspensiones RT e independiente para TR. A mayor Pe una suspensión RT se comporta como una suspensión TR, esta tendencia se rompe con el aumento de Φ , lo que da a entender que posiblemente existe una competencia entre la hidrodinámica y la quimiotaxis en sistemas TR. En suspensiones Prob, los espectros de energía creados por la rotación son menores a los reportados para suspensiones interactuantes y NI, demostrando que la quimiotaxis es la responsable de la agregación de nadadores.

Para explicar el comportamiento de suspensiones RT y la posible competencia entre la hidrodinámica y la quimiotaxis se calculo el tiempo de quimiotaxis, τ_{chemo} . En la Figura 5-12(a), se define el τ_{chemo} como el tiempo en el que la concentración $C(\mathbf{x})$ en una suspensión RT alcanza un valor homogéneo. La evolución de $C(\mathbf{x})$ depende de Pe y de la velocidad del fluido, que a su vez depende de Φ . A su vez $C(\mathbf{x})$ controla la formación y rompimiento de la agregación de nadadores, los flujos generados por estos pueden modificar la distribución y dinámica de $C(\mathbf{x})$. Por esta razón se concluyó que la dinámica de una suspensión depende de Pe y de Φ .

Entre más grande sea τ_{chemo} una suspensión RT tiende a agregarse, ya que cumple $C(\mathbf{x}) > C_{\text{target}}$ Figura 5-12 (a). Entre más pequeño sea τ_{chemo} la suspensión RT se comporta como una suspensión NI (curva azul). En las Figuras 5-12 (b)(I)-(II) τ_{chemo} disminuye con la fracción de nadadores, en forma $\tau_{\text{chemo}} \sim \exp^{-\Phi}$ (línea punteada). Esto significa que el aumento de Φ genera flujos muy altos que facilitan la mezcla y el transporte del escalar. Al disminuir la cantidad de nadadores los flujos no facilitan un transporte y el Pe controla el sistema. Como las interacciones hidrodinámicas dependen de Φ , para fracciones diluidas o muy diluidas el valor de τ_{chemo} serán altos.

Por lo tanto la dependencia de $\tau_{\text{chemo}}(Pe, \Phi)$ se puede representar de forma

$\tau_{\text{chemo}}/\tau_a \sim Pe \left((1/\Phi)\exp^{-n\Phi} + 1 \right)$, línea punteada de la Figura 5-12 (b) (condición (I)), donde n es un coeficiente de ajuste.

Las curvas en las Figuras 5-12(b)(I-II) comparten una característica en común, y es que tienen un punto de inflexión en $\Phi^* = 0,078539$ (Flecha negra). Como lo indican las tendencias de la curva, para valores superiores a Φ^* la suspensión es dominada por la hidrodinámica, para valores inferiores, la suspensión se agrega y es dominada por la quimiotaxis (Pe) y la hidrodinámica.

Las condiciones iniciales, tienen tendencias similares para τ_{chemo} , pero al realizar una ampliación y comparando las dos condiciones (rojo y negro) (recuadro) Figura 5-12(b), se observa una diferencia en $Pe = 2000$. $\Phi > 0,078$, la condición (I) tiene un τ_{chemo} más alto que la

condición (II). Esto implica que La agregación de nadadores es mayor para la condición I y que pueden existir diferencias respecto a la distribución inicial del escalar, y que esta diferencia puede depender también de Pe .

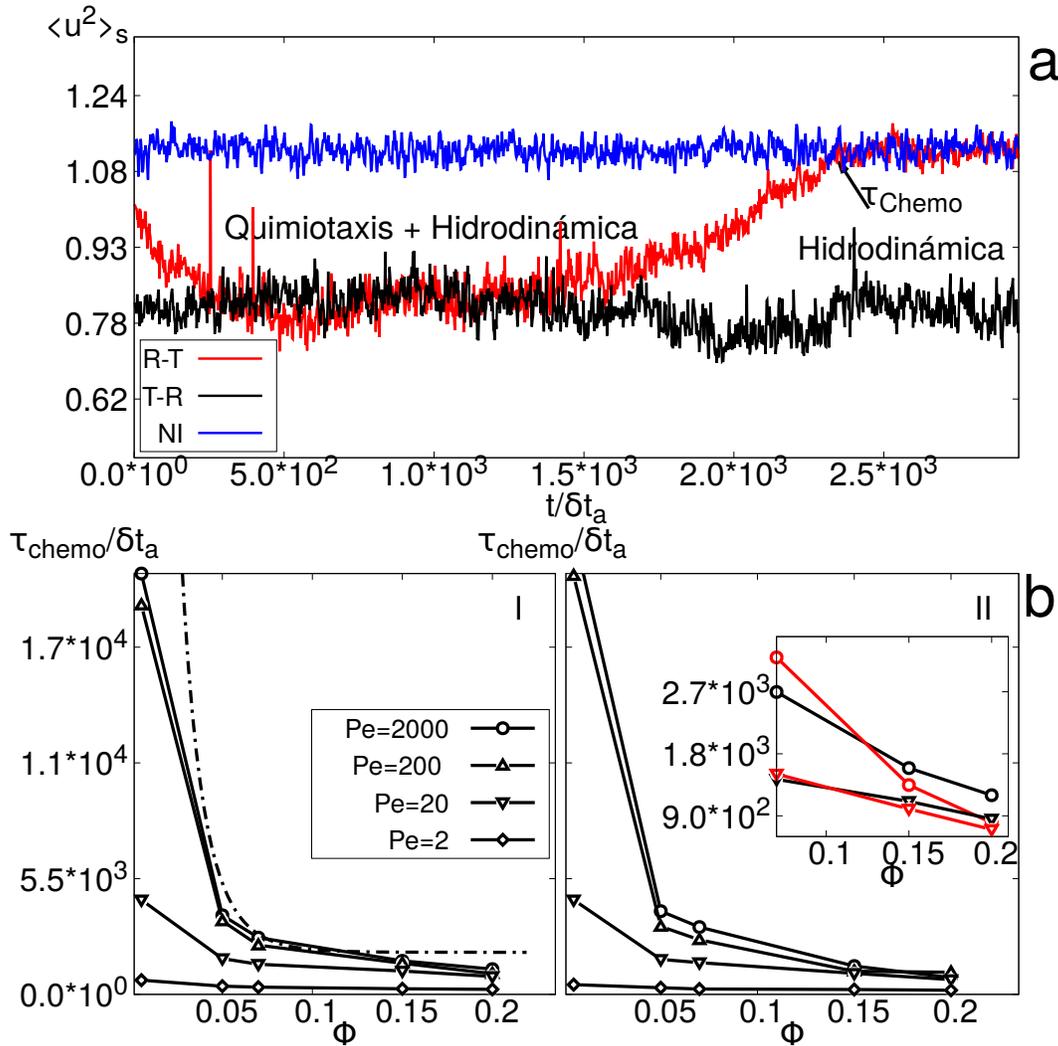


Figura 5-12: Efecto de la quimiotaxis. (a) Comparación de $\langle u^2 \rangle_s$ en suspensiones RT y TR a $Pe = 2000$ y $\Phi = 0,078539$, la flecha indica el tiempo τ_{chemo} , condición (I). Los cortes transversales del canal, revelan que a medida que pasa el tiempo hay una formación y fragmentación de agregados para el sistema RT. (b) Tiempo de agregación τ_{chemo} en función de Φ variando el Pe para la Condición(I) y la Condición (II) de la sustancia quimioatrayente, ambos sistema RT. El recuadro de Figura 5-12 comparación entre los valores para las condición (I) negro y la condición (II) rojo.

La Figura 5-13 resume lo que ocurre con ambas suspensiones RT y suspensiones TR Figuras 5-13(a)-(b). El modelo (ecuación 4.18) hace que cada individuo de la suspensión tenga un movimiento que dependa de la información de la sustancia en el medio y como resultado surgen movimientos colectivos espontaneos. En el caso de sistemas RT, se genera una agregación de nadadores y una posterior desintegración del mismo, en zonas donde se cumple la condición de la ecuación 4.18. En una suspensión TR, por otro lado, cuenta con la misma información de C_{target} , no depende de el Pe , solo del Φ . Los nadadores en este tipo de suspensiones cambian su modo de nado a *Run*, al hacerlo tienden a alejarse de las zonas de mayor concentración hacia zonas de menor concentración, generando agregación de nadadores lejos de zonas concentradas. En ambos casos, el modelo genera una agregación de partículas NI, cuyo modo de nado es la rotación.

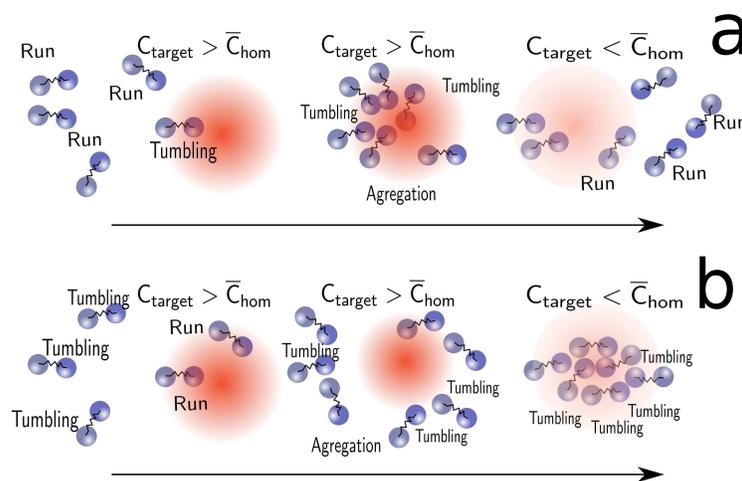


Figura 5-13: Esquema de las fluctuaciones de densidad, formación y desintegración de nadadores en la suspensión provocado la quimiotaxis. La flecha negra es la línea de tiempo (a) Suspensión RT (b) suspensión TR.

A modo de conclusión; el modelo usado permite capturar fenómenos colectivos basados en la información que obtiene cada individuo en el fluido, estos movimientos surgieron de forma espontanea, generando fluctuaciones de densidad de nadadores como la formación y rompimiento de agregados. Acorde a los resultados expuestos fenómenos de agregación en sistemas de partículas activas con quimiotaxis fueron reportados por [133], [14], [204]. Se encontro tambien que las fluctuaciones de densidad dependen del modo de nado, del sistema y a su vez dependen de las interacciones hidrodinámicas, relacionadas con Φ , y de Pe a través de un proceso de retroalimentación. En sistemas RT existe una competencia entre

Φ y Pe (o la quimiotaxis), por otro lado en suspensiones TR se puede concluir que sistema es controlado por Pe , ya que los flujos en sistemas TR disipan muy poca energía cinética en largas distancias y es insuficiente para asegurar la mezcla de $C(\mathbf{x})$.

Listado de observaciones Sistema RT

Curvas $C_{uu}(\mathbf{r})$, l_{corr} , longitudes de Correlación ξ y ξ_{cm}

En la Figura 5-14(a) las curvas de la función de autocorrelación para $\Phi = 0,078$, se extiende en función del Pe , esta observación concuerda con algunas de las conclusiones anteriores. En base a los planos de la Figura 5-11(c) el efecto del Pe sobre los campos de velocidad generados por la suspensión son caóticos en distancias cortas, producto de la agregación de dipolos. En largas distancias los campos de velocidad disminuyen pero no tienden cambiar la dirección, este significa que el flujo que el flujo esta muy correlacionado. Esta tendencia se diferencia de una suspensión NI a partir de $Pe \geq 20$.

Los puntos donde inicia la anti-correlación l_{corr} Figura 5-14(b), tiene un punto de inflexión en $\Phi = 0,078$ en todos los planos x_3 , y como ya se habia mencionado, es a partir del cual la hidrodinámica empieza a controlar el sistema, lo que causa que se rompan los agregados haciendo que los puntos de anticorrelación se aproximen a los puntos de suspensiones NI. El Pe a bajas Φ , controla los puntos de anti-correlación l_{corr} . Los ordenes de magnitud de l_{corr} en $x_3 = 0,05H$ y $x_3 = 0,00H$ son cercanos a $l_{corr} \sim 2H$, es decir que el tamaño del canal influye en las distancias de correlación de flujos en largas distancias. En altas Φ .

El valor de ξ en la Figura 5-14(c), sufre una disminución respecto a Φ en el plano $X_3 = 0,76H$, hasta Φ^* . En $x_3 = 0,50H$ y $x_3 = 0,00H$ ξ tienen comportamiento similar al de l_{corr} , para $Pe \geq 200$ con un maximo en $\Phi = 0,053668$. Esto significa que en las paredes, la agregación se rompe primero, para en $\Phi = 0,07835$, debido a la cercanía con la condición de frontera. Pero en $x_3 = 0,50H$ y $x_3 = 0,00H$ ξ los dipolos tienden a permanecer agregados para $\Phi \geq 0,07835$. La razón es que cerca de las paredes, se alcanza más rápido la condición $C(\mathbf{x}_{cm}) \leq C_{target}$, lo que significa que los nadadores en las paredes rompen el agregado primero, esto no ocurre en el centro del canal.

La Figura 5-14(d) el valor ξ_{cm} , no se observa una tendencia muy concluyente de estas distancias respecto al valor del Pe . Mientras en las paredes se observa una tendencia al crecimiento de la longitud de correlación ξ_{cm} , lejos de las paredes, el valor de ξ_{cm} permanece constante para los sistemas RT en función de Φ , esto significa que las tendencias de agregación persisten lejos de las paredes.

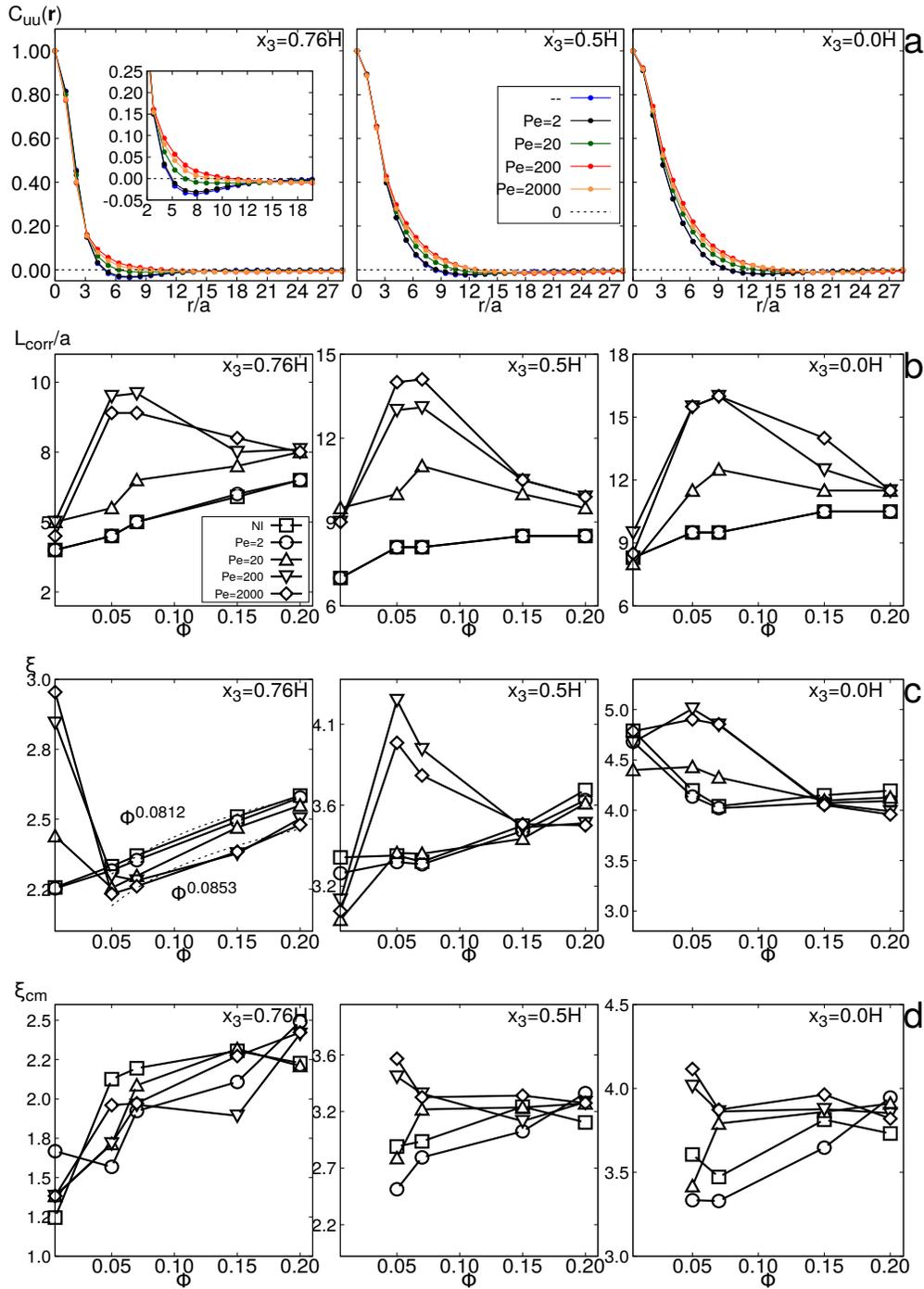


Figura 5-14: (a) Función de autocorrelación para la velocidad del fluido, para una suspensión RT a $\Phi = 0,078539$, (b) l_{corr} en función de Φ (c) Longitud de correlación ξ medida con la $\exp^{-(r/\xi)^2}$ en función de Φ , (d) Longitud de correlación ξ_{cm} en función de Φ .

Coefficientes del regimen disipativo η y $E_{k\eta}$ y del régimen de inyección α y $E_{k\alpha}$

En la Figura 5-15(a) se corroboran las conclusiones preliminares del sistema RT, el aumento la tasa de disipación de energía en altas frecuencias solo ocurre en bajas Φ , además exhibe una clara dependencia hacia el Pe . En la Figura 5-15(b) la pendiente η disminuye conforme aumenta el número de Pe para todos los planos x_3 hasta un $Pe \leq 20$. Lo que significa que, los sistemas RT en altas frecuencias presentan una velocidad de disipación de energía más lenta comparados con los sistemas NI. Sin embargo la velocidad de disipación tiende ser constante respecto al aumento de Φ . En $x_3 = 0,50H$ y $x_3 = 0,0H$ los sistemas RT sufren un decrecimiento de la tasa de disipación $\Phi^{-0,0332}$. Lo anterior significa que en las paredes hay una organización de dipolos (nadadores) que se rompe rápidamente, pero en el centro del canal la agregación de *Tumblers* disipa energía de una manera más lenta comparada con NI, a medida que aumenta Φ . La cantidad de energía disipada en altas frecuencias $E_{k\eta}$, Figura 5-15(c) aumenta para suspensiones RT cerca de las paredes, este aumento se da a partir de $Pe > 20$ y cambia a razón de $\Phi^{0,906}$, el aumento en la potencia de Φ significa que en las paredes, la agregación genera un ordenamiento de dipolos que puede ser responsable de este comportamiento. Lo que coincide con las conclusiones de los espectros de energía en bajas frecuencias hechas anteriormente. En los planos $x_3 = 0,05H$ y $x_3 = 0,00H$ las tendencias de las curvas indican que el valor de $E_{k\eta}$ tiende a disminuir, consecuencia de la agregación no ordenada de dipolos que rotan o *Tumblers*.

El valor de la pendiente α , Figura 5-15(d), es menor comparado con suspensiones NI en todos los planos x_3 . Lo que significa que la velocidad de disipación en largas distancias es más baja, debido a los bajos flujos generados por la agregación de dipolos. A partir de $\Phi \geq 0,0785$, α aumenta mediante una ley de potencias como $\Phi^{0,2032}$, esto se debe a la transición de entre la formación y rompimiento del agregado de dipolos, y a medida que aumente Pe esta transición es más abrupta para fracciones superiores a la mencionada. En $x_3 = 0,50H$ se incrementa la diferencia de la velocidad de la disipación entre NI y RT a medida que aumenta Pe . En $x_3 = 0,00H$, hay una disminución de la velocidad de disipación en función de Φ , nuevamente relacionado con los flujos generados por *Tumblers*, y a la baja cantidad de estos en el centro del canal. El valor del coeficiente $E_{k\alpha}$, Figura 5-15(e) es más bajo para suspensiones interactuantes en todos los x_3 si $\Phi \leq 0,0785$, mientras el sistema NI es asintótico con Φ , los sistemas interactuantes en función del Pe tienen una tendencia con una potencia mayor.

En conclusión la disipación es más lenta, en altas frecuencias pero tiende a disipar una mayor energía, lo que se traduce en una acumulación de la energía disipada en cortas distancias. En bajas frecuencias, la velocidad de disipación y energía disipada es menor, pero el cambio en función de Φ en una ley de potencias es mayor a sistemas NI, especialmente en las paredes y puede asociarse lo con la transición entre la quimiotaxis (formación de estructuras ordenadas) e hidrodinámica (rompimiento de estas estructuras) se ve reflejada en los espectros de energía.

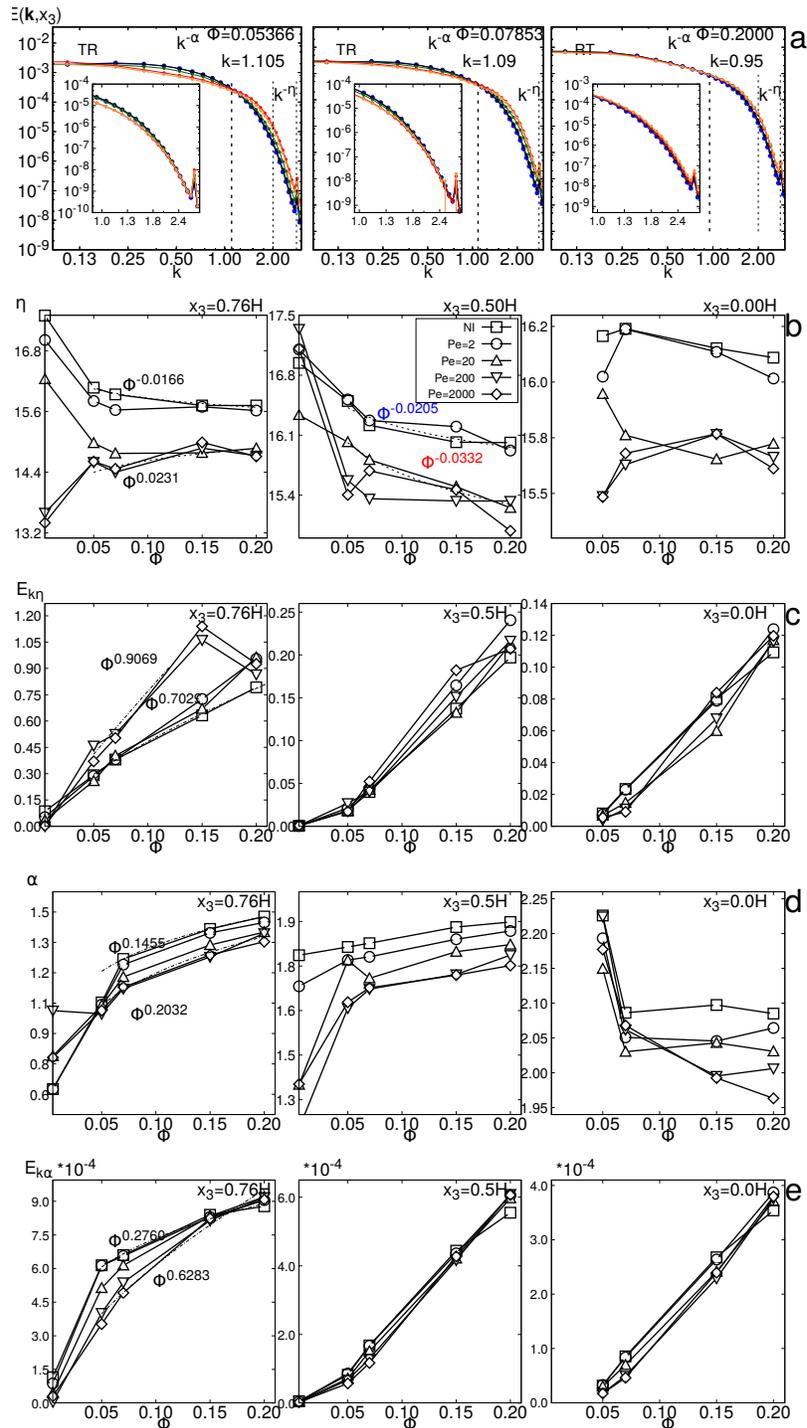


Figura 5-15: Coeficientes de ajuste de las pendientes $E(\|k\|) = E_{k\eta}k^{-\eta}$ y $E(\|k\|) = E_{k\alpha}k^{-\alpha}$ en función de Φ para suspensiones RT. (a) Espectros de energía en $x_3 = 0,760H$ y $x_3 = 0,0H$ (b) η (c) $E_{k\eta}$ en el régimen disipativo (d) α y (e) $E_{k\alpha}$ en el régimen de inyección.

Coefficientes η_{cm} y E_k para las correlaciones de energía cinética desde el centro de masa

En la Figura 5-16(a) la pendiente η_{cm} depende del valor de Pe . El rango de la función se ajusto entre $0,639 < k < 1,98$ cuya logitud $3,1733a < l < 9,832a$. Para Pe altos el valor de α_{cm} , en todos los x_3 , es menor en menos de un orden de magnitud al valor de suspensiones NI, esto se debe a la agregación de partículas. La tendencia de estas curvas es similar a la presentada en la Figura 5-15(b), la velocidad de disipación desde el centro de masa permanece constante en función de Φ , pero incrementa a medida que se aleja de las paredes. El coeficiente E_{kcm} Figura 5-16(b), demuestra nuevamente que en $x_3 = 0,76H$ la agregación de nadadores genera una alta disipación de energía cinética en cortas distancias. También se puede apreciar un pico en $\Phi = 0,05$, el cual marca la diferencia entre el control de la quimiotaxis y la hidrodinámica, cerca de las paredes. Lejos de las paredes y en el medio del canal $x_3 = 0,00H$ el valor de E_{kcm} para todas las suspensiones convergen a un valor muy cercano en $\Phi \geq 0,105$.

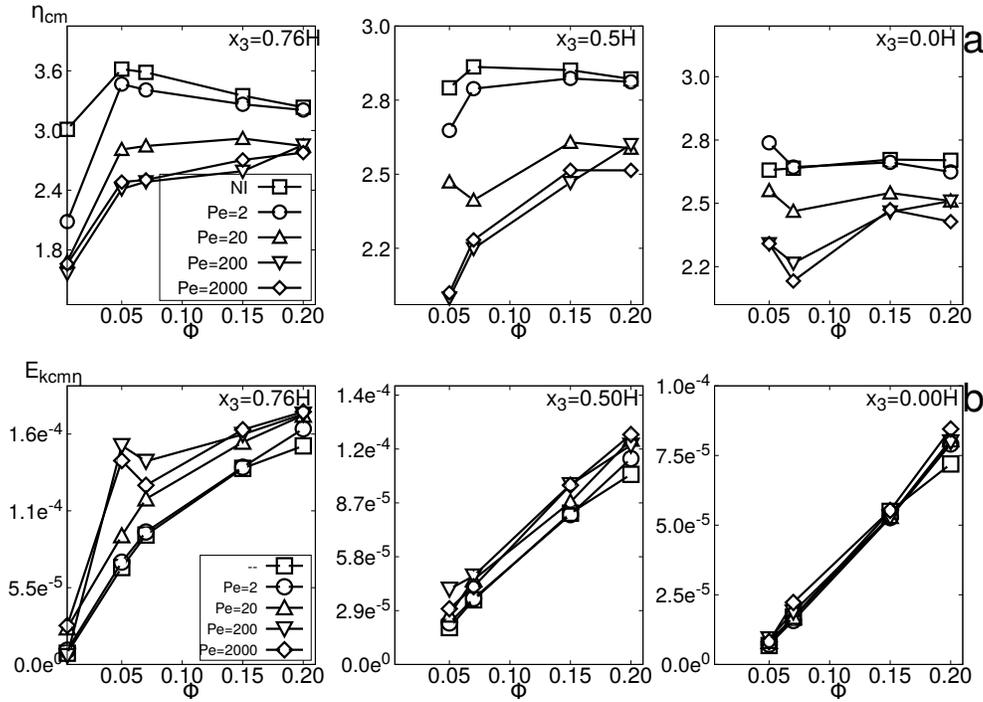


Figura 5-16: Valores de los exponentes $-\eta$ de las pendientes $E_{cm}(k) \sim E_k k^{-\eta_{cm}}$ para las correlaciones de energía cinética medida desde el centro de masa en el espacio de fourier, ecuación 4.42 en los diferentes planos (a) $x_3 = 0,76H$ (b) $x_3 = 0,5H$ (c) $x_3 = 0,0$.

Disfusividades y velocidades medias cuadraticas

En la Figura 5-17 se resume el comportamiento de los nadadores y trazadores (para largos

tiempos). En la Figura 5-17(a) el desplazamiento cuadrático medio para los nadadores tiene un comportamiento anómalo para sistemas RT, debido a la agregación de dipolos, la flecha señala el aumento de Pe que coincide con el aumento de la agregación y la disminución de la movilidad. Como se mencionó antes para largos tiempos el sistema RT alcanza un valor homogéneo de la concentración $C(\mathbf{x})$, y en ese punto tiende a comportarse como un sistema NI. Debido al comportamiento anómalo de las curvas se decidió cuantificar solo la movilidad de los trazadores mediante las curvas de desplazamiento cuadrático medio. Mientras los trazadores, no presentan un cambio significativo respecto a la variación del número de Pe . Todas las simulaciones se realizaron hasta tiempos largos (mayores que τ_{chemo}) (régimen difusivo). Por lo tanto la variación de D_t respecto a Φ , Figura 5-17 (Izquierda), especialmente para fracciones volumétricas altas, no hay un cambio significativo del valor de D_t respecto a el efecto del Pe para $\Phi^* < 0,07852$.

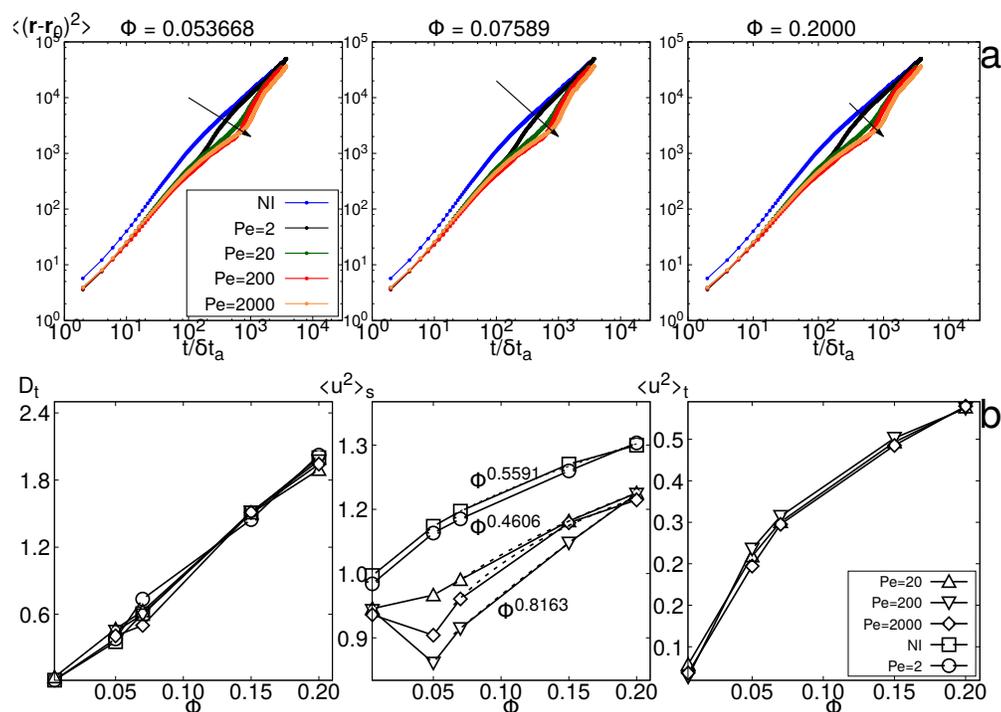


Figura 5-17: (a) Desplazamiento cuadrático medio para los nadadores a diferentes concentraciones. (b) Coeficientes de movilidad de los Trazadores, $\langle u^2 \rangle_s$; $\langle u^2 \rangle_t$.

La diferencia entre los valores de las suspensiones interactuantes y las suspensiones NI, para valores superiores a Φ^* es de menos de un orden de magnitud. Esta diferencia representa el peso estadístico de la agregación de nadadores, cuya duración es mayor y que disminuye la movilidad de los trazadores, Figura 5-12. EL $\langle u^2 \rangle_s$ Figura 5-17 (b) es un resultado

esperado a partir de la Figura 5-12. Demuestra que la suspensión depende fuertemente del Pe y que el punto crítico de la suspensión es Φ^* en el cual indica que tipo de interacción es la que domina a la suspensión.

Finalmente, la velocidad cuadrática media para los trazadores $\langle u^2 \rangle_t$ Figura 5-17 (b) tiene una tendencia similar para los dos casos, sistemas RT y NI. La suspensión RT no tubo un efecto determinante sobre la dinámica de trazadores, debido al tiempo de simulación usado que en altas concentraciones de nadadores hace que las tendencias de las curvas sean muy similares.

Curvas $C_{uu}(\mathbf{r})$

La correlación calculada en el fluido Figura 5-18(a) se corrobora que una suspensión con una alta frecuencia de *Tumbling*, como suspensiones TR o Prob, la tendencia de la curva crece respecto a r . Como se discutido en la Figura 5-11(b) se debe a que los flujos de esta suspensión no cambian de dirección en largas distancias. En $x_3 = 0,76H$ los nadadores de una suspensión *Prob* tienden a alinearse con la pared Figura 5-11(d), esto explica la similitud respecto a la curva de una suspensión NI. Sin embargo en $x_3 = 0,50H$ y $x_3 = 0,0H$ el comportamiento de la curva no alcanza al cero, las tendencias del flujo son muy largas.

Los puntos de anticorrelación l_{corr} Figura 5-18(b) son mucho mayores que en sistemas NI, esto corrobora que los flujos no tienden a cambiar de estructura para largas distancias, esto se refieren a flujos con una misma dirección y baja velocidad producto de la agregación de dipolos. En $x_3 = 0,50H$ y $x_3 = 0,00H$ tienen como úntos de anticorelación mas largos o no los presentan debido a que los flujos de estos sistemas son muy bajos por la rotación de nadadores, para sistemas *mathsfTR* y *Prob*.

Las longitudes ξ Figura 5-18(c) por el contrario decrecen respecto a los valores de suspensiones NI, en las paredes. Mientras que lejos de las paredes, hay un valor crítico de $\Phi = 0,0785$ despues del cual la longitud ξ decae. Este comportamiento, lejos de las paredes, observado antes en suspensiones RT, tambien se presenta para suspensiones *Prob*. hay un decrecimiento de x_3 . Por lo anterior las tendencias de ξ se ven afectadas por la frecuencia entre el *Run* y *Tumbling* de los nadadores. Y la disminución a partir de $\Phi = 0,0785$ implica que al aumento de interacciones hidrodinamicas reduce el valor de ξ es sistemas *R-T*, *T-R* o *Prob*.

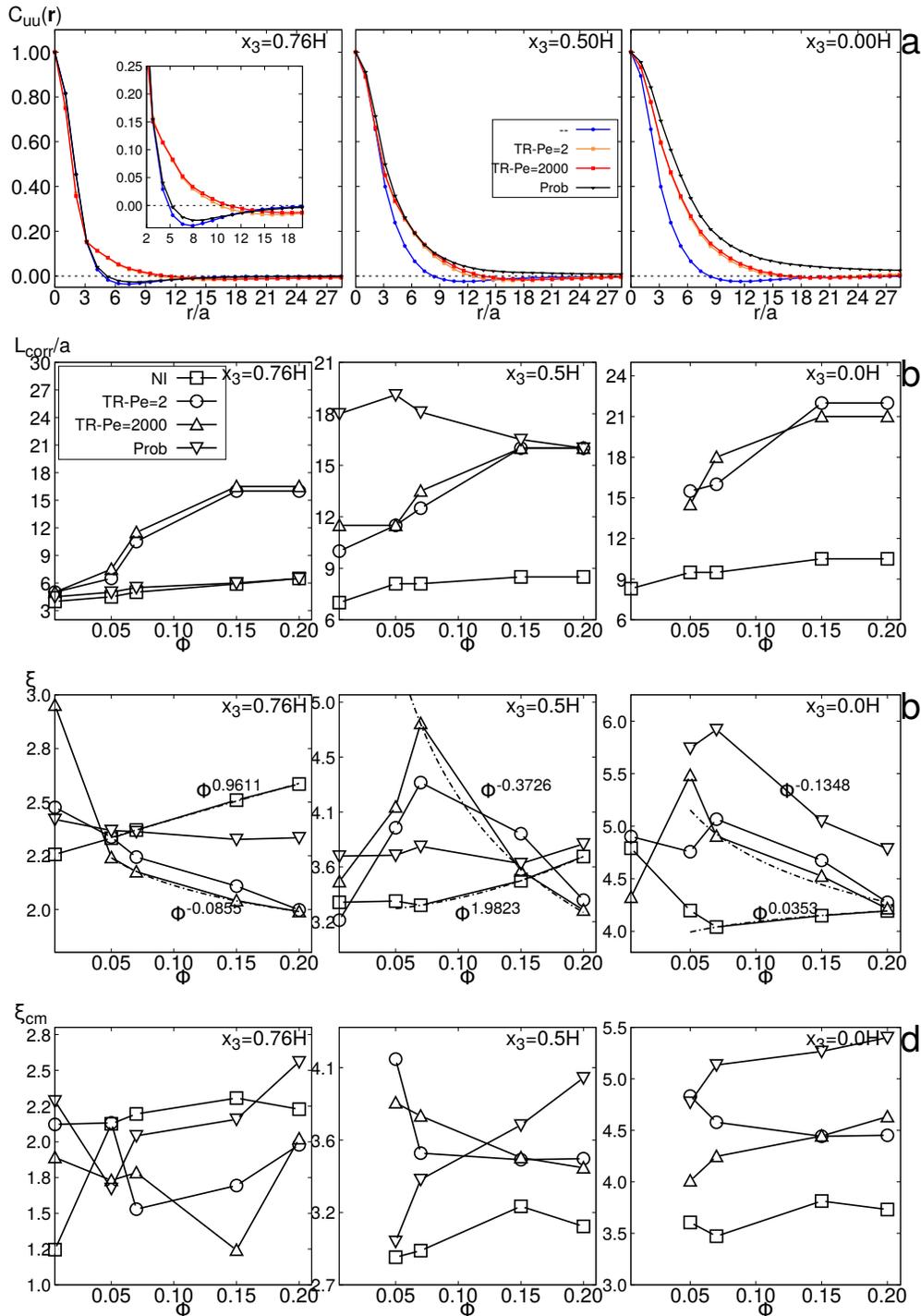


Figura 5-18: (a) Función de autocorrelación para la velocidad del fluido, para una suspensión TR a $\Phi = 0,078539$, (b) l_{corr} en función de Φ (c) Longitud de correlación ξ medida con la $\exp^{-(r/\xi)^2}$ en función de Φ , (d) Longitud de correlación ξ_{cm} en función de Φ .

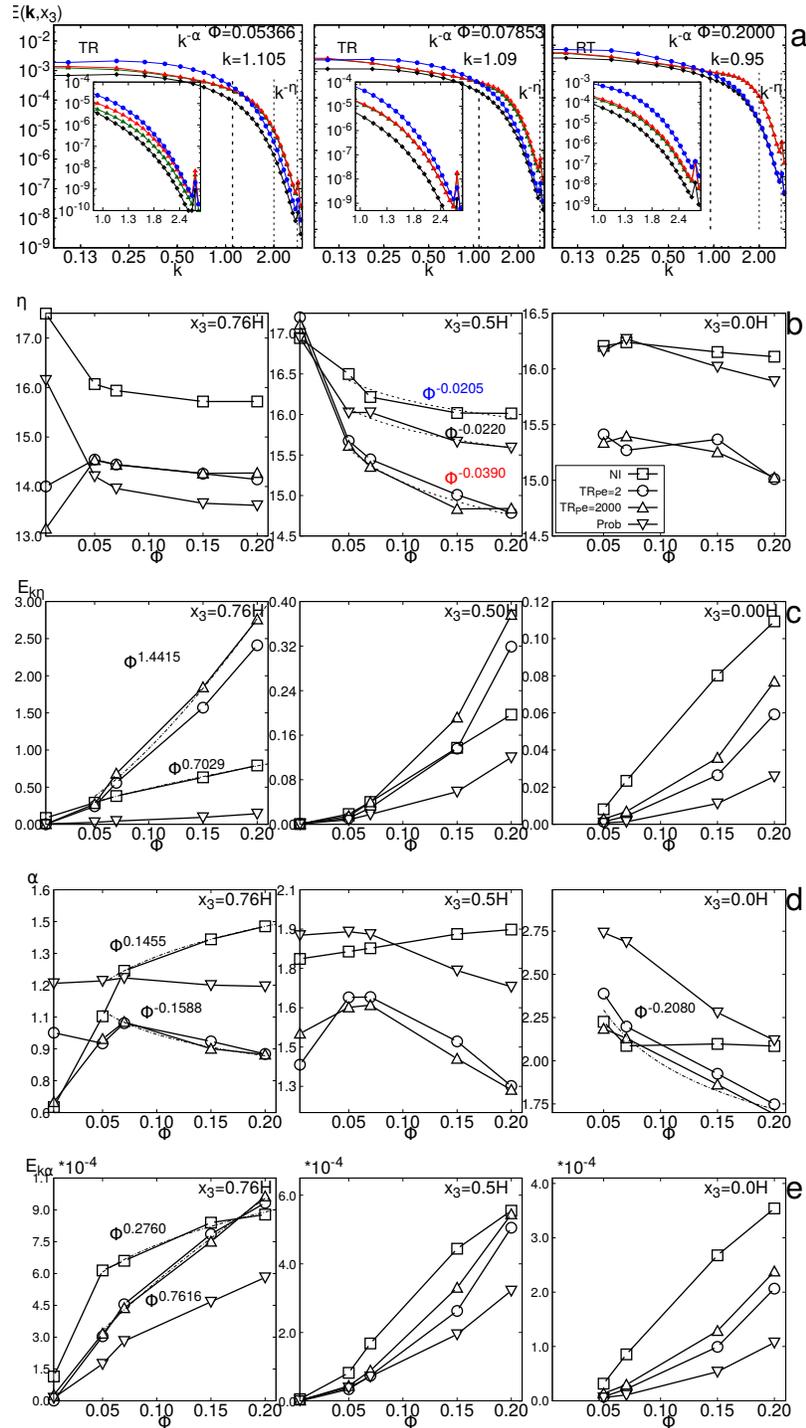


Figura 5-19: Coeficientes de ajuste de las pendientes $E(\|k\|) = E_{k\eta} k^{-\eta}$ y $E(\|k\|) = E_{k\alpha} k^{-\alpha}$ en función de Φ para suspensiones TR. (a) Espectros de energía en $x_3 = 0,760H$ y $x_3 = 0,0H$ (b) η (c) $E_{k\eta}$ en el régimen disipativo (d) α y (e) $E_{k\alpha}$ en el régimen de inyección.

Coefficientes del régimen disipativo η y E_k y del régimen de inyección α y E_k .

En la Figura 5-19 (a) las tendencias de los espectros de suspensiones TR no presentan una variación respecto al Pe , suspensiones Prob disipan menos energía que los demás sistemas, pero tienen una tendencia muy similar a los sistemas NI.

En la Figura 5-19(b), la pendiente η disminuye con Φ de manera muy lenta, lo que significa que la velocidad de disipación es más baja que en los sistemas NI, sin embargo se mantiene constante respecto a la cantidad de nadadores. En $x_3 = 0,50H$ la curva de η vs Φ cambia como $\Phi^{-0,0390}$, mientras que para los sistemas Prob tiene una tendencia similar a las suspensiones NI. El incremento del coeficiente $E_{k\eta}$ Figura 5-19(c) las suspensiones TR se relaciona con la agregación de nadadores, como se determinó en el análisis de las Figuras 5-10 y 5-11. Se evidencia que la agregación disipa mayor energía solo en las paredes, posiblemente por la agregación con una organización de nadadores en la pared.

La pendiente $-\alpha$ Figura 5-19(d), en bajas frecuencias, disminuye con Φ . Esta disminución que también se da lejos de $x_3 = 0,76H$, se relaciona no solo con la agregación de dipolos, sino con el flujo generado por la rotación de los mismos, que, como ya se dijo es muy bajo. Como se mencionó en la Figura 5-15(d) entre mayor sea la agregación menor serán las distancias en las que se disipa la energía. En el plano $x_3 = 0,0H$ la curva de los sistemas Prob tiene los valores más altos. Por lo que puede pensarse que α también puede estar dando información relacionada con la dirección del flujo (o cambio de dirección) en largas distancias.

El coeficiente $E_{k\alpha}$ Figura 5-19(e) disminuye acorde al análisis hecho, para el régimen de inyección en las Figuras 5-10 y 5-11. La rotación y la agregación de nadadores, con bajas frecuencias de *Run* generan que la disipación sea muy baja en largas distancias, y muy alta en cortas distancias.

Coefficientes η_{cm} y E_{kcm} para las correlaciones de energía cinética desde el centro de masa

En la Figura 5-20, la pendiente η_{cm} de la correlación de energía cinética desde el centro de masa, tiene un comportamiento similar al de la Figura 5-19 (a). Confirmando que la energía disipada desde el centro de masa de cada nadador tiene una longitud característica menor que las suspensiones. El valor de E_{kcm} , Figura 5-20(b), coincide con el comportamiento de la Figura 5-19 (b). La agregación no es una consecuencia del movimiento colectivo de nadadores con altas frecuencias de rotación.

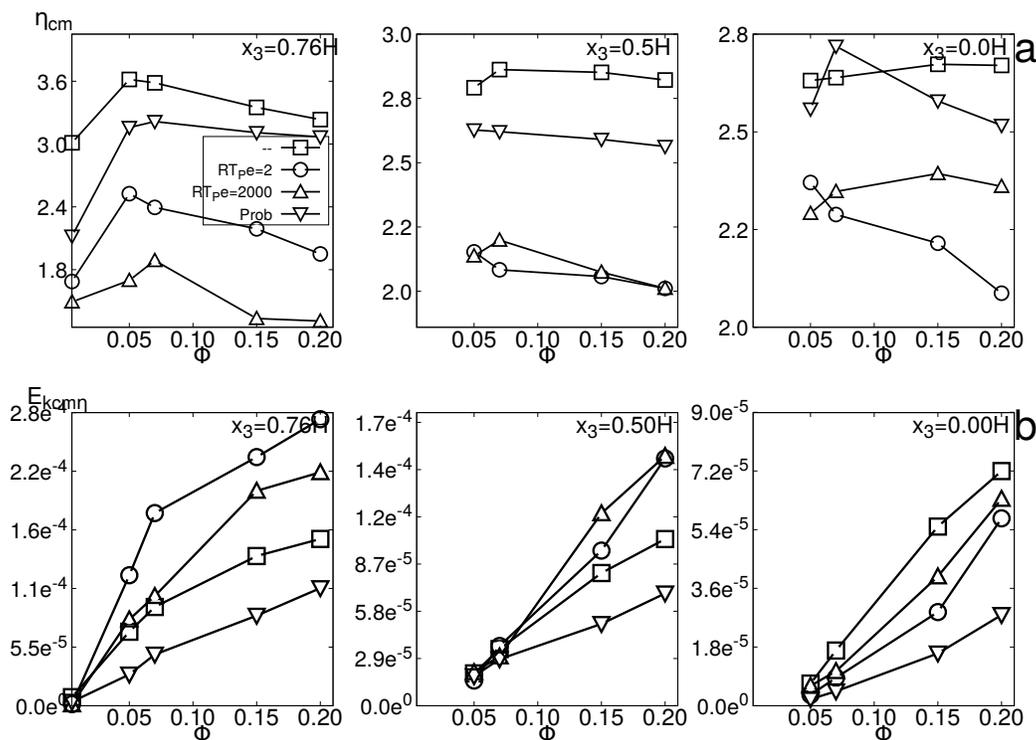


Figura 5-20: Valores de los exponentes de los espectros de energía cinética desde el centro de masa ecuación 5-4 en los diferentes planos (a) $x_3 = 0,76H$ (b) $x_3 = 0,5H$ (c) $x_3 = 0,0$.

Difusividad de trazadores y velocidad cuadratica media para nadadores y trazadores

En la Figura 5-21(a) el modelo de quimiotaxis, es independiente del valor de Pe , como lo muestra la curva de desplazamiento cuadrático medio para los nadadores, en este sistema no se alcanza un régimen difusivo para suspensiones RT , por lo que se trabajara nuevamente con la movilidad de D_t . Un Pe muy alto genera una disminución de la movilidad. En el caso de suspensiones $Prob$, la ausencia de un agregado es el cuaseante de la diferencia de los valores de D_t . En $\phi = 0,078$ el valor de D_t tiende a ser similar al de suspensiones NI , ocurre un fenómeno contrario al que ocurría con RT en las mismas ϕ . Esto significa, que el movimiento colectivo generado por la hidrodinámica, es superado por el movimiento colectivo de el acople quimiotaxis-hidrodinámica que cobra importancia a partir de $\phi = 0,078$. Como resultado una difusividad de los trazadores. En suspensiones $Prob$, las interacciones hidrodinámicas son menores, posiblemente por la ausencia de un un auto-ensamble como lo es la agregación.

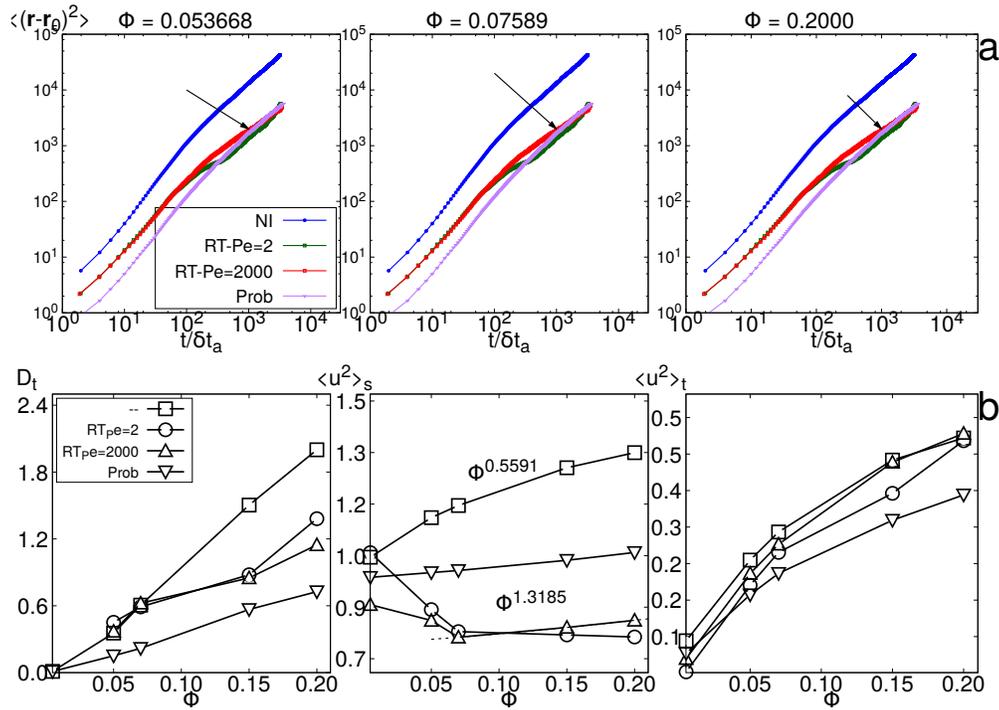


Figura 5-21: Difusividad de (a) Trazadores (b) Velocidad Cuadratica media; aqui (\square) para Nadadores $\langle u^2 \rangle_s$ y (c) Velocidad Cuadratica media para los Trazadores

La velocidad cuadrática media Figura 5-21(b), de la suspensión RT disminuye hasta $\Phi = 0,078$, aumentando de forma muy lenta hasta $\Phi = 0,2$ resultado de la agregación ocasionada por la quimiotaxis. En una suspensión Prob, aunque no presentan agregación su velocidad media cuadrática es menor al de una suspensión NI. Se evidencia entonces que nadadores que rotan con mayor frecuencia presentan una baja movilidad.

En Figura 5-21(b) la velocidad cuadrática media de los trazadores, es muy baja para suspensiones Prob en comparación con sistemas TR, los flujos y ausencia de movimientos colectivos pueden ser la razón. En el caso de suspensiones TR la tendencia difiere del Pe , pero es muy cercana a valores de un sistema NI. Esto significa que la baja movilidad de los trazadores, se da por que las interacciones hidrodinámicas en sistemas con quimiotaxis tienen longitudes de correlación que decaen con la cantidad de nadadores, las velocidades medias cuadraticas son altas en trazadores, para sistemas TR por que el agregado genera velocidades muy altas en cortas distancias.

La diferencia entre sistemas RT y TR es la dependencia de ambos sistemas hacia el Pe , mientras en sistemas RT hay una dependencia muy fuerte hacia el Pe , en suspensiones TR no se

observo una dependencia respecto a este parametro, lo que hace que el Pe se a un parametro clave en estos sistemas. Mientras que la difusividad de la concentración de la sustancia quimioattractora, controla la dinámica de sistemas las suspensiones RT, en sistemas TR la dinaámica no depende en absoluto de el valor de Pe .

Esta diferencia cuaso que los sistemas RT se agregaran en torno a puntos donde la concentración del escalar es mayor a un valor umbral C_{target} . Por otro lado en suspensiones TR la agregación surge de forma espontanea pero de forma contraria, es decir lejos de puntos donde el escalar es mayor al umbral C_{target} .

Por otro lado RT presentó una dependencia respecto a Φ , se encontro que existe un valor de $\Phi \sim 0,075$ a partir del cual las suspensiones tienden a romper la agregación de manera mas rapida como lo indico el las tedencias de τ_{chemo} . La agregación de estas suspensiones tiende a formar estructuras ordenadas en las paredes, como lo indicaron las $g(r, x_3)$, sin embargo en posiciones lejos de la superficie solida no genera estas estructuras. Se indico que los puntos o posiciones donde se cruzan las curvas, se relacionaron con el tamaño del canal H . La rotación de los dipolos en RT y TR, genera flujos muy bajos en largas distancias, tal y como lo demostró la suspensión Prob y las funciones de correlación para el fluido y desde el centro de masa de los nadadores.

Los espectros de energía y los coeficientes η , α , $E_k\alpha$ y $E_k\eta$ en suspensiones con quimiotaxis, presentaron coincidencias en altas frecuencias, donde la agregación de dipolos causa un aumento de la tasa de disipación de energía pero esta sucede de manera mas lenta comparada con suspensiones NI. En bajas frecuencias, la disipación de energía es mucho menor, por los flujos generados por los *Tumblers* (dipolos mayor cantidad de *Tumbling*).

La ley de potencias usada para describir el comportamiento de los coeficientes de los espectros de energía vs Φ revelo que, la agregación y posterior rompimiento de nadadores en sistemas RT incremento las tendencias de estos respecto a suspensiones no quimiotacticas especialmente en las paredes, donde la agregación tiende a formar estructuras de nadadores con un orden particular.

Las curvas anomalas de desplazamiento cuadratico medio, en las suspensiones quimiotacticas, comparadas con suspensiones NI, evidenciaron que a mayor agregación menor de nadadores menor movilidad de los mismo. La velocidad cuadratica media de nadadores si presento un cambio significativo, y fue su comportamiento en el tiempo el que permitio la obtención de los tiempos τ_{chemo} . Sin embargo el efecto de la quimiotaxis sobre el comportamiento en los trazadores no se evidencio en sistemas RT, para tiempos largos recueraban las tendencias del regimen difusivo, muy similares al de suspensiones sin quimiotaxis. En el caso de sistemas TR la disminución en los flujos generados si presento un cambio significativo sobre la dinamica de los trazadores y su velocidad media cuadratica. En este sistema no se incluyeron las medidas en bajas concentraciones $\Phi = 0,005$, debido a que las curvas del desplazamiento cuadratico nunca llegaron a alcanzar el régimen difusivo para los trazadores.

Efecto de las condiciones iniciales del escalar

Los efectos sobre la dinámica se pueden observar en la Figura 5-22. En sistemas RT Figura 5-22(a), que son dependientes de la Pe , la difusividad de los trazadores D_t difieren en las condiciones para $Pe = 200$, $Pe = 2000$. Se presenta una variación respecto a las condiciones de iniciales del en $\Phi \sim 0,1$, para la condición (II), donde se presenta un mínimo local.

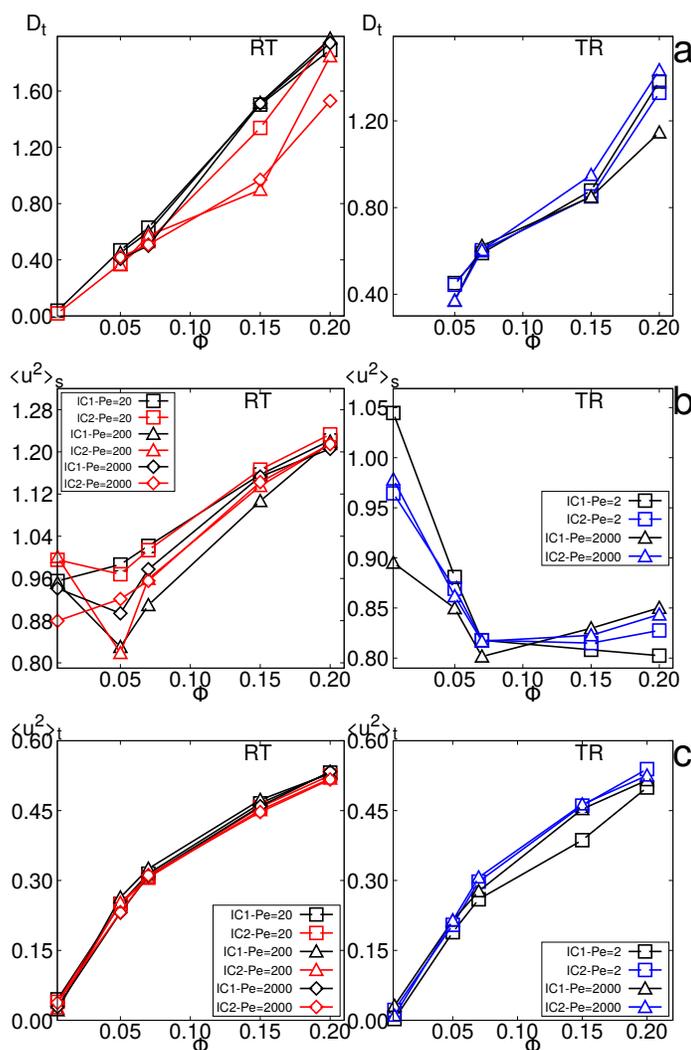


Figura 5-22: Comparación de las Difusividades de Trazadores de sistemas RT y TR en función de Φ (a). Velocidades cuadráticas medias de los nadadores (b). Velocidad cuadrática media de los trazadores (c).

Sin embargo no se observan cambios de en este punto para $\langle u^2 \rangle_s$, ni para $\langle u^2 \rangle_t$. Esto

podría asociarse a un error estadístico, ya que la tendencia es la misma. La $\langle u^2 \rangle_s$ Figura 5-22(b) disminuye para la condición (I) comparado con la condición (II) para $Pe = 200$. La $\langle u^2 \rangle_t$ Figura 5-22(c) se comporta igual para las condiciones iniciales y Pe . De la Figura 5-22(b-c) se puede concluir que la variación en las condiciones iniciales, no genero un cambio significativo sobre la dinámica de las suspensiones, posiblemente por que el tamaño del canal asegura una que los nadadores entren en contacto durante mas tiempo con la sustancia quimioatrayente $C(\mathbf{x})$.

Efecto de la Variación del tamaño del canal H

La variación del tamaño del canal, incrementa las curvas de autocorrelación del fluido Figura 5-23(a). Como se uso la misma resolución para malla, las longitudes de los flujos son mas largas debido a que el periodo del canal es mas largo.

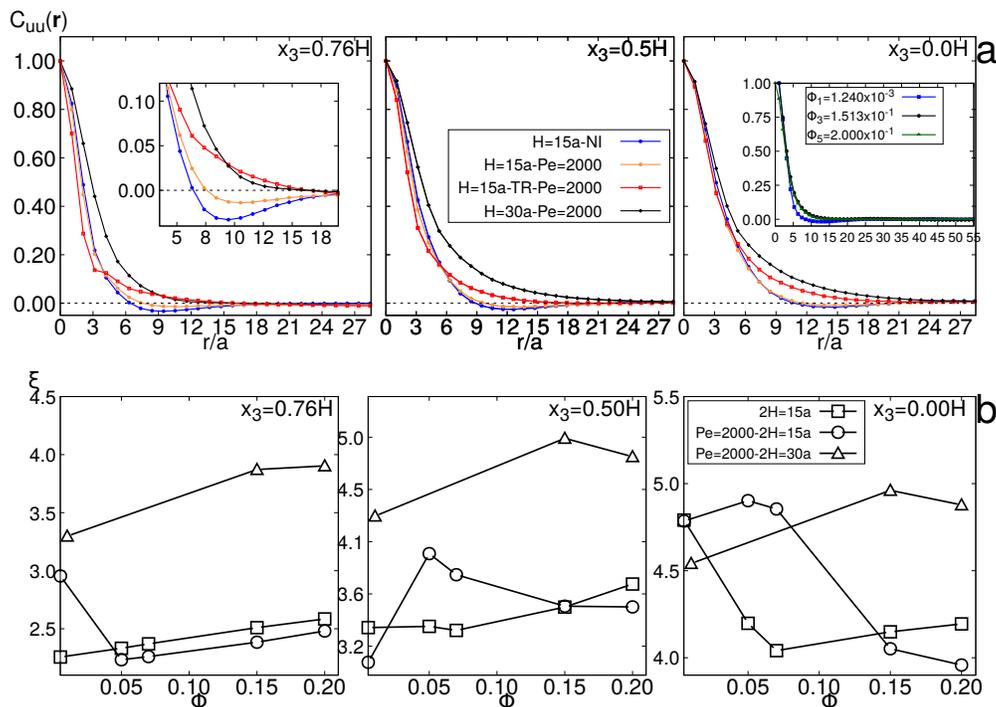


Figura 5-23: Comparación de las distancias funciones de auto-correlación variando la altura del canal, y a $Pe = 2000$ y $\Phi = 0,200$ (a) longitudes de correlación ξ (b).

En cuanto al valor de la longitud de correlación ξ , experimenta un aumento de su valor, como su se tratara de una suspensión TR, es decir flujos asociados a dipolos muy agregados. Lo anterior concide con los resultados de Wioland y colaboradores [86] en canales con ancho variable.

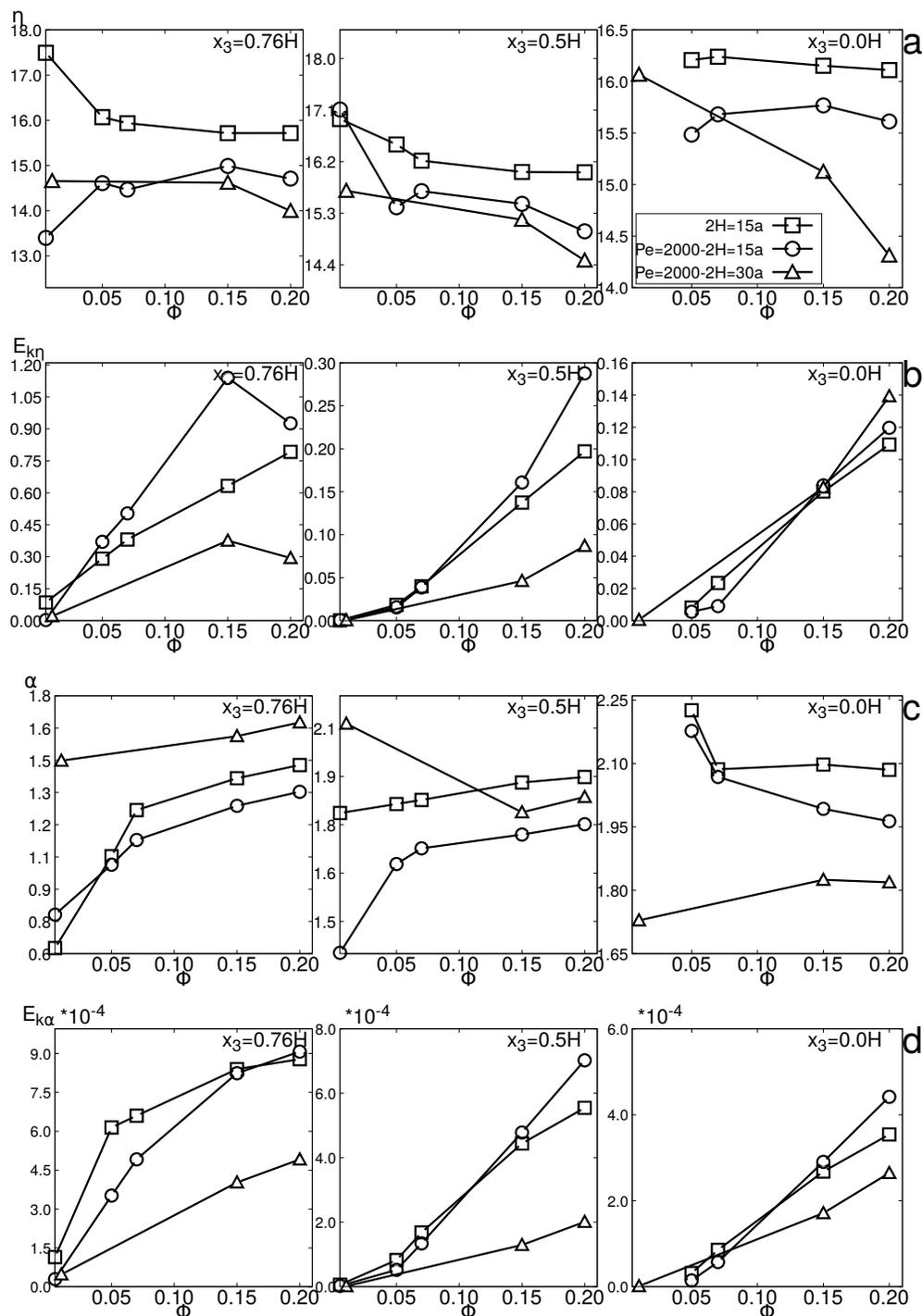


Figura 5-24: Coeficientes de ajuste de las pendientes $E(\|\mathbf{k}\|) = E_{k\eta}k^{-\eta}$ y $E(\|\mathbf{k}\|) = E_{k\alpha}k^{-\alpha}$ en función de Φ para suspensiones interactuantes RT variando H en los planos medidos. η (a) y $E_{k\eta}$ (b) en el régimen disipativo. α (c) y $E_{k\alpha}$ (d) en el régimen de inyección. En cada figura el sistema NI es (— □).

Los coeficientes de los regímenes disipativo y de inyección k^η y k^α , Figura 5-24, presentan un comportamiento similar respecto a suspensiones con un mayor confinamiento.

El valor de la pendiente η , Figura 5-24(a), es constante en las paredes, disipación muy lenta mientras que lejos de estas el valor de la pendiente disminuye en función de Φ , la disipación es mas lenta pero con un decrecimiento constante.

En la Figura 5-24(b), la influencia del tamaño del canal sobre E_{k^η} , hace que los flujos en distancias cortas disipen muy poca energía, comparados con canales mas pequeños, lo que significa que los flujos son mas bajos que en sistemas mas confinados.

La velocidad de disipación en largas distancias, Figura 5-24(c), en las paredes es muy rápida en las paredes, pero muy lenta en el centro del canal, como el espacio es mas grande se acumula mayor cantidad de *Tumblers*, en el centro del canal, generando flujos muy lentos.

El valor de Figura 5-24(d) E_{k^α} genera una muy baja energía en bajas frecuencias, lo que implica que al aumentar el tamaño del canal, la suspensión RT a a $Pe = 2000$ tiende a comportarse como una suspensión con a **Prob**.

La función de distribución radial, Figura 5-25, demuestra que al aumentar la altura del canal, hay un comportamiento similar al anteriormente espuesto (para $H = 15$). Hay unos picos en la Figura 5-25 (a), para la curva $\Phi = 0,01$ que coinciden con las distancias características de los nadadores $r \sim 5$, similar a los presentados en la Figura 5-9.

El cambio mas significativo respecto a las condiciones iniciales del escalar (I) y (II), en el sistema $\Phi = 0,01$. Mientras en el sistema (I), Figura 5-25 (Arriba), hay una mayor agregación de nadadores, en la condición (II), no se presenta este comportamiento. Se nota que en las paredes $x_3 = 0,76H$ la diferencia es mas significativa, mientras que en las zonas $x_3 = 0,50H$, $x_3 = 0,00H$ hay una tendencia similar a una agregación de nadadores.

La condición (I) cubre una mayor cantidad de espacio transversal en dirección x_3 comparada con la condición inicial (II). Por lo tanto en la condición (II) tiene un area mas pequeña en esta dirección. Sin embargo al aumentar Φ , la mezcla del sistema para ambas condiciones genera una agregación mayor, del orden de H (línea punteada) en las paredes.

El confinamiento causa una diferencia en la agregación de las suspensiones, debido al tamaño y las posiciones de las dos condiciones iniciales de la concentración $C(\mathbf{x})$ en el canal. En la condición I, los dipolos se agregan tanto en $x_3 = 0,76H - 0,50H$ como en $x_3 = 0,0H$, en la condición II no hay una agregación de dipolos en las paredes, excepto para fracciones volumetricas en el limite semi-diluto. Esta diferencia respecto a sistemas con $H = 15a$, donde la agregación ocurre para todos los Φ usados, se debe a que con un mayor confinamiento las interacciones de los dipolos con $C(\mathbf{x})$ ocurre de forma inmediata e independiente de la forma geometrica de la distribución, por el tamaño del canal, mientras que en un canal con menor confinamiento la distancia es mayor como se establecio en el capitulo 3, por lo que la disponibilidad de $C(\mathbf{x})$ dependera de la geometria de la distribución inicial del escalar.

Por otro lado la línea de intercepción de las curvas, se ubica $r > H$, lo que sugiere que el confinamiento tiene una influencia sobre el tamaño del agregado de nadadores.

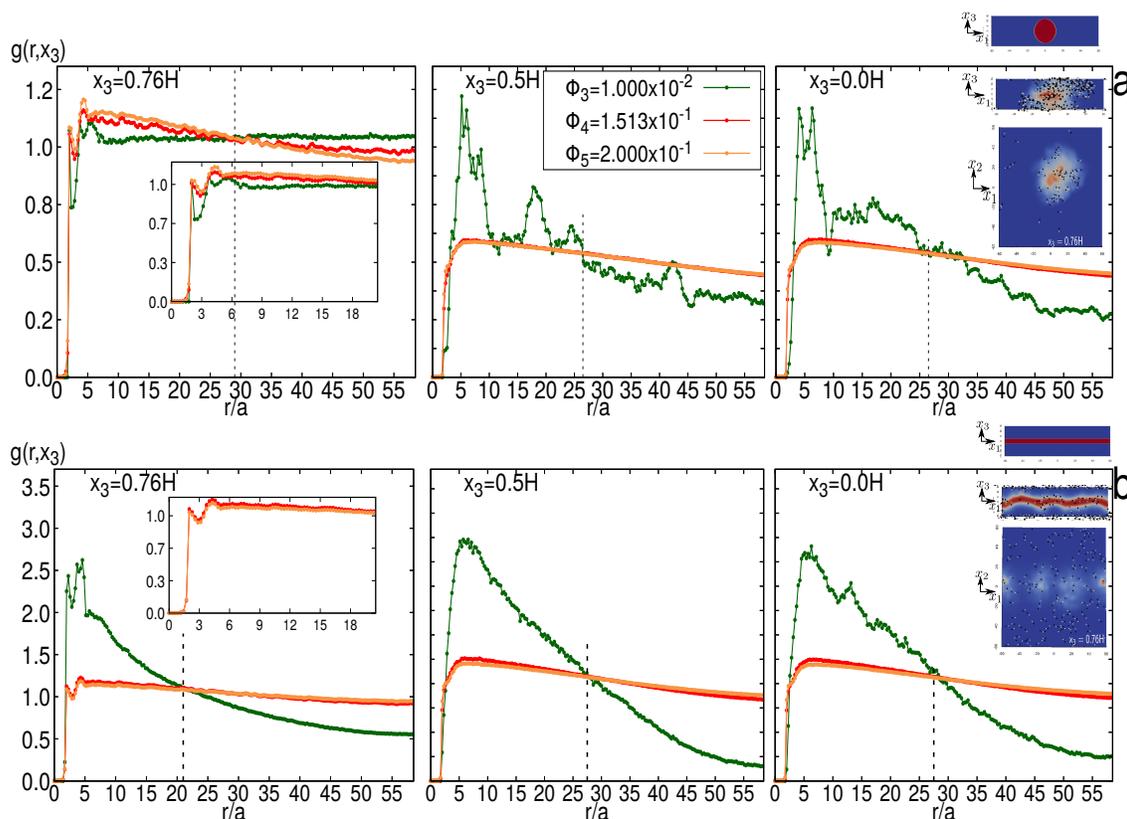


Figura 5-25: Función de distribución radial $g(r)$. En suspensiones con $H = 30a$, en las dos condiciones iniciales del escalar (a) condición inicial I. (b) condición inicial II.

Conclusiones generales.

$g(r, x_3)$: Depende de la posición en x_3 . En sistemas NI no generan agregación, la densidad es constante para $r \geq 5$, se comporta como un gas activo, el pico que se observa en $x_3 = 0,0H$ se asocia a una orientación que no es paralela a las paredes. En suspensiones $R - T$ depende del Pe y de Φ , de forma que a mayor Pe y bajos $\Phi \leq 0,07859$ hay una mayor duración de la agregación, en $x_3 = 0,5H$ y $x_3 = 0,0H$ hay un solo pico en $r \sim 2$ lo que significa que hay una orientación no paralela a las paredes, esta orientación de Run , las distancias máximas de agregación se relacionan con el tamaño del sistema H . En suspensiones $T - R$, la agregación no depende de Pe , los nadadores tienden a alejarse del escalar, los picos de la función en el plano $x_3 = 0,76H$ sugieren que en las paredes los nadadores tienen una orientación particular.

η : En suspensiones NI, el exponente decrece respecto a Φ en forma $\eta \sim -0,016$, que es muy

lento y es casi constante, pero la relación entre la energía y la ley de potencias de la frecuencia se mantiene constante, la disipación de energía en frecuencias altas es más rápida que en bajas frecuencias. En suspensiones $R - T$ depende del Pe , existe una tendencia costate para η la disipación de energía cinética es más lenta que en un sistema NI. En suspensiones $T - R$, η no depende de Pe , la disipación es más lenta que suspensiones NI, lejos de las paredes la disipación de energía es más lenta a medida que disminuye Φ .

$E_{k\eta}$: En suspensiones NI, el exponente decrece respecto forma $\sim 0,702$ en bajas frecuencias, implica que la disipación aumenta con el número de nadadores. En suspensiones $R - T$ depende del Pe , existe una tendencia monotonamente casi lineal $\sim 0,906$, lo que concuerda con la disipación de energía debido a la agregación de nadadores. En suspensiones $T - R$, la tendencia monotonamente en frecuencias bajas es $\sim 1,45$, que concuerda con el hecho de que la agregación es mayor para suspensiones $T - R$ respecto a las demás suspensiones, en el centro del canal la agregación de nadadores en *Tumbling* no genera un aumento en la agregación de nadadores.

α : En suspensiones NI, el exponente aumenta respecto a Φ en un valor cercano a $\eta \sim \Phi^{0,1455}$, la energía para bajas frecuencias aumenta cerca de las paredes, pero es constante en la mitad del canal, es decir que en las paredes el tamaño característico de vórtices aumenta en las paredes a medida que Φ aumenta. En suspensiones $R - T$ α depende del Pe , la tendencia es $\sim \Phi^{0,204}$ la disipación de energía cinética es más lenta que en un sistema NI. En suspensiones $T - R$, η no depende de Pe , pero decae como $\sim \Phi^{-0,1588}$ la disipación en bajas frecuencias es más lenta que suspensiones NI.

$E_{k\eta}$: En suspensiones NI, el exponente decrece respecto forma $\sim \Phi^{0,702}$ en bajas frecuencias, implica que la disipación aumenta con el número de nadadores. En suspensiones $R - T$ depende del Pe , existe una tendencia monotonamente casi lineal $\sim \Phi^{0,906}$, lo que concuerda con la disipación de energía debido a la agregación de nadadores. En suspensiones $T - R$, la tendencia monotonamente en frecuencias bajas es $\sim 1,45$, que concuerda con el hecho de que la agregación es mayor para suspensiones $T - R$ respecto a las demás suspensiones, en el centro del canal la agregación de nadadores en *Tumbling* no genera un aumento en la agregación de nadadores.

$E_{k\alpha}$: En suspensiones NI, el exponente aumenta monotonamente $\sim \Phi^{0,276}$, en bajas frecuencias la energía cerca de las paredes aumenta de forma monotonamente, pero es constante en la mitad del canal, la tendencia se mantiene en el centro del canal.

En suspensiones $R - T$ la tendencia aumenta, por causa de la agregación en forma $\sim \Phi^{0,6283}$

disminuye en cuando Pe disminuye, en bajas frecuencias $\Phi \leq 0,0758$ la disipación de energía es mas lenta comparada con un sistema NI . En suspensiones $T - R$, la tendencia del coeficiente no depende de Pe , y aumenta $\Phi^{0,7616}$ pero los valores alcanzados son mucho mas bajos que en suspensiones NI , lo que significa que en bajas frecuencias la energía es muy baja comparado con otros sistemas.

ξ : las longitudes de correlación son menores para suspensiones con quimiotaxis que no dependan del numero de Pe , comparadas con longitudes de correlación de suspensiones que dependen del Pe , suspensiones $Prob$ y suspensiones NI . En $X_3 = 0,76H$ las tendencias de para suspensiones $R - T$ o $T - R$ es muy similar al de α .

D_t : La difusividad para los trazadores tiene un comportamiento constante para suspensiones NI y $R - T$, para largos tiempos un sistema $R - T$ se comporta como una suspensión NI , por lo tanto en el régimen difusivo los coeficientes de movilidad son los mismos para estas dos suspensiones. En suspensiones $T - R$ la movilidad de los trazadores disminuye, no solo por la agregación de nadadores si no tambien por que las interacciones hidrodinámicas de nadadores rotando son inferiores a las comparadas con nadadores que nadan linealmente.

$\langle u^2 \rangle_s$: En suspensiones $R - T$ la dependencia de Φ y Pe hacen que exista un punto de inflexión en $\Phi \sim 0,05347$, a concentraciones mayores la hidrodinámica causa una mezcla rapida de la sustancia quimioattractora, por lo tanto para altos Φ el sistema tiende a comportarse como una suspensión NI . En suspensiones $T - R$ a fracciones mayores que $\Phi \sim 0,05347$ $\langle u^2 \rangle_s$ permanece constante respecto a suspensiones NI .

H : El tamaño del canal genera flujos muy bajos en suspensiones RT a $Pe = 2000$, lo que significa que entre mayor espacio, la hidrodinámica no controla completamente el sistema, la quimiotaxis es la que controla el sistema, haciendo que la mezcla del escalar sea mas lenta, lo que significa que hay una mayor cantidad de células *Tumblers* en la suspensión. Tambien hay un efecto de la variación del canal sobre las condiciones iniciales de $C(\mathbf{x})$. Lo que impacta directamente sobre la agregación de nadadores en la suspensión.

Capítulo 6

Conclusiones y recomendaciones

Se desarrolló un modelo multi-escala para partículas activas en confinamiento, basado en modelos previos [34], [89], pero incluyendo la quimiotaxis en cada nadador, mediante un proceso de toma de decisiones basado en información que toma cada nadador del fluido. Se incorporo la dinámica de transporte de un escalar pasivo $C(\mathbf{x})$. La quimiotaxis se modelo como un arbol de toma de decisión, en las que cada nadador rota en una dirección aleatoria en función de el valor de concentración del escalar. Aunque el proceso de toma de decisiones se baso en variables aleatorias, para signar una dirección aleatoria de rotación al dipolo (nadador), se encontro que la quimiotaxis genera movimientos colectivos espontaneos que son amortiguados por las interacciones hidrodinámicas en la suspensión. Estos movimientos colectivos esponatenos resultaron en una agregación a favor y en contra de las zonas de mayor concentración de $C(\mathbf{x})$. Esta diferencia se basa en que las suspensiones con quimiotaxis RT dependen de Pe del $C(\mathbf{x})$, las suspensiones con quimiotaxis TR no dependen de la difusividad del sistema.

Las correlaciones usadas permitieron caracterizar el comportamiento del fluido dedio a la presencia de nadadores con y sin quimiotaxis. Los espectros de energía brindaron información util sobre, las escalas y la forma en la que la energía se disipa desde la suspensión hacia fluido. Se evidencio que en suspensiones NI el comportamiento es de largo alcance, con una mayor disipación de energía en largas ditancias y de de manera rapida, esta conclusión se obtuvo en base a las pendientes de los regémenes encontrados. Mientras que en suspensiones con quimiotaxis, o suspensiones con probabilidades impuestas Prob , los flujos son muy bajos en largas distancias,pero la quimiotaxis induce a una agregación de nadadores, lo cual incrementó la energía disipada en cortas distancias.

Los sistemas RT presentaron una competencia entre la hidrodinámica y la quimiotaxis que se caracterizó mediante el valor $\tau_{\text{chemo}}(\text{Pe}, \Phi)$ que es el tiempo de agregación. La presencia de las paredes, indujo a una autoorganización de los dipolos cerca de ellas, en sistemas con quimiotaxis, cosa que no ocurrio en suspensiones no interactuantes. Esta agregación con una

organización aparente de dipolos, genero que en las paredes los flujos fuesen mas altos, asi como la disipación de energía. Tambien se encontro que hay una relación entre el tamaño de los agregados y el tamaño del canal, lo que implica que el confinamiento puede controlar los flujos generados por estos suspensiones con quimiotaxis.

No se observó una influencia clara del efecto de las condiciones iniciales del escalar sobre la dinámica de la suspensión para un $H = 15a$, sin embargo para $H = 30a$ si se observa una diferencia clara de este comportamiento, caracterizado por la función de distribución radial. Al aumentar el tamaño del canal el sistema tiende a ser controlado por la quimiotaxis, ya que los flujos generados por los dipolos, tienden tendencias similares a las de sistemas TR. Los resultados encontrados aqui demuestran que el modelo de quimiotaxis aunque es un modelo simple, revela que el acople entre las interacciones hidrodinamicas y la quimiotaxis tiene comportamientos impredecibles respecto a la variación de parametros como la fracción volumetrica, difusividad de la sustancia quimioattractora y modo de nado. El resultado de este acople genera una retroalimentación entre el efecto de los nadadores en el medio y la información que estos toman en el medio, lo que significa que la hidrodinámica es indispensable para estudios mas detallados de sistemas con quimiotaxis en modelos meso-escala.

Recomendaciones

Se deben implementar métodos numéricos que faciliten paralelizar el modelo computacional, con el fin de simular suspensiones mas concentradas y tiempos de agregación mas largos. Es necesario simular sistemas con un rango mas amplio en parametros como Φ , difusividades de la sustancia quimioattractora, H , con el fin de tener tendencias mas claras. Tambien realizar al menos tres replicas sobre resultados de las simulaciones para evitar comportamientos anamalos en diferentes variables medidas. Realizar aproximaciones a sistemas mas concretos como suspensiones bacterianas usando difusividades de sustancias como aminoacidos, azucares y gases O_2 o CO_2 , los cuales fueron exclidos en este trabajo. El modelo de quimiotaxis, debe modificarse en base a la fenomenología del proceso biológico, esto implica la inclusion de la cinética de ligando receptor o de gradientes espaciales de concentración.

Se deben realizar analisis en las trayectorias de los nadadores, con el fin de obtener distribuciones de los angulos de *Run – Tumbling* durante la quimiotaxis.

Una perspectiva en este proyecto es usar este modelo para el estudio de suspensiones de bacterias magnetotacticas, o en fluidos viscoelasticos como cristales liquidos, los cuales plantea la inclusion de campos magenticos externos e internos, o la dinámica de crsitales liquidos bajo condiciones de flujo ya que en la literatura apenas se esta explorando este campo.

Apéndice A

Anexo: Derivació de la fuerza debido a un potencial de Gay-Berne

El Potencial entre dos nadadores A y B separados por una distancia $\mathbf{s} = \mathbf{r}_c = \mathbf{x}_{Ac} - \mathbf{x}_{Bc}$ con un vector director unitario $\hat{\mathbf{a}}$ y $\hat{\mathbf{b}}$ se definio como:

$$U(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{s}}) = 4\epsilon(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{s}}) \left\{ \frac{\sigma_0^{12}}{[s - \sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{s}}) + \sigma_0]^{12}} - \frac{\sigma_0^6}{[s - \sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{s}}) + \sigma_0]^6} \right\} \quad (\text{A.1})$$

$$\sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{s}})/\sigma_0 = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{[\hat{\mathbf{s}} \cdot (\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{b}})]^2}{1 + \chi \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}}} + \frac{[\hat{\mathbf{s}} \cdot (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{b}})]^2}{1 - \chi \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}}} \right\}}} \quad (\text{A.2})$$

$$\chi = \frac{(\sigma_c/\sigma_l)^2 - 1}{(\sigma_c/\sigma_l)^2 + 1}, \chi' = \frac{1 - (\epsilon_c/\epsilon_l)^{1/\nu}}{(\epsilon_c/\epsilon_l)^{1/\nu} + 1} \quad (\text{A.3})$$

Donde σ_c , longitud cola a cola, σ_l longitud lado a lado, ϵ_c , es la energia cola a cola y ϵ_l es la energia lado a lado. Donde ν es un coeficiente de ajuste.

$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\mathbf{s}}{s}$ es la distancia normalizada entre los centros de masa de los nadadores. Debido a la complejidad de la derivacion del termino de energia de repulsion de pozo potencial $\epsilon(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{s}})$

se tomara como constante y cuyas unidades características son $\epsilon(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{r}}) = \epsilon_0 = \zeta \mathbf{V}_{\text{dumb}} \mathbf{a}$; por otro lado $\chi = \frac{(l_{\text{swim}}^2 - \sigma_0^2)}{(l_{\text{swim}}^2 + \sigma_0^2)}$, $\sigma_0 = l_{\text{swim}}/2,5$. Luego el término de la fuerza \mathbf{f}_j^{GB} que experimenta un nadador j debido a otros nadadores se define como [194]:

$$\mathbf{f}_j^{\text{GB}} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{s}} \hat{\mathbf{s}} - s^{-2} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \theta} [\boldsymbol{\kappa} - (\boldsymbol{\kappa} \cdot \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathbf{s}}] \quad (\text{A.4})$$

θ es $\theta = \sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{s}})^{-2}$. El torque generado experimentado por A debido a la interacción con una molécula B se define como [194]:

$$\boldsymbol{\tau}_A = s^{-1} \left(\frac{\chi((\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{a}}) - \chi(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{b}}))}{1 - (\chi \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})^2} \right) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \theta} \times \boldsymbol{\kappa} \quad (\text{A.5})$$

El torque generado experimentado por B debido a la interacción con una molécula A se define como:

$$\boldsymbol{\tau}_B = s^{-1} \left(\frac{\chi((\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{b}}) - \chi(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{a}}))}{1 - (\chi \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})^2} \right) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \theta} \times \boldsymbol{\kappa} \quad (\text{A.6})$$

Los términos $\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{s}} \hat{\mathbf{s}}$, $\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \theta}$ y $\boldsymbol{\kappa}$ son:

$$\boldsymbol{\kappa} = 2 \left\{ \mathbf{s} - \frac{s\chi((\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{a}}) - s\chi(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{b}}))}{1 - (\chi \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})^2} \hat{\mathbf{a}} - \frac{s\chi((\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{b}}) - s\chi(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{a}}))}{1 - (\chi \hat{\mathbf{b}} \cdot \hat{\mathbf{a}})^2} \hat{\mathbf{b}} \right\} \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \theta} = 12\epsilon_0 \left(\frac{\sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{r}})}{\sigma_0} \right)^3 \left(\frac{2\sigma_0^{13}}{(r - \sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{r}}) + \sigma_0)^{13}} - \frac{\sigma_0^7}{(r - \sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{r}}) + \sigma_0)^7} \right) \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{s}} = 24 \frac{\epsilon_0}{\sigma_0} \left(\frac{2\sigma_0^{13}}{(r - \sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{r}}) + \sigma_0)^{13}} - \frac{\sigma_0^7}{(r - \sigma(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{r}}) + \sigma_0)^7} \right) \quad (\text{A.9})$$

Finalmente las fuerzas experimentadas en cada bead i debido a la fuerza y al torque experimentados por el nadador j (con un vector director $\hat{\mathbf{d}}_j$ del dipolo) por la presencia de otros

nadadores se expresa como:

$$\mathbf{f}_i^{j, \text{Exclu}} = 0,5\mathbf{f}_j^{\text{GB}} + (1 - 2\delta_{i2})\tau_j^{\text{GB}} \times \frac{\hat{\mathbf{d}}_j}{l} \quad (\text{A.10})$$

Apéndice B

Anexo: Transformada rápida de Fourier discreta (DFFT)

Las ecuaciones 4.29 y 4.19 Se solucionan con un metodo hibrido Diferencias Finitas-Espectral. Para garantizar la periodicidad en la caja, se usa una transformada discreta de Fourier para luego solucionar la ecuacion resultante en la direccion confinada con diferencias finitas. Las varibales de las ecuaciones 4.28 y 4.19 en el espacio real y en el espacio de fourier de definen como :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, z)_{far} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.1})$$

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = \sum_x \sum_y \mathbf{u}_{far}(\mathbf{x}, z) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.2})$$

$$C(\mathbf{x}, z) = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \hat{C}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.3})$$

$$\hat{C}(\mathbf{k}) = \sum_x \sum_y C(\mathbf{x}, z) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.4})$$

$$\boldsymbol{\rho}_{far}(\mathbf{x}, z) = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \widehat{\boldsymbol{\rho}}_{far}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.5})$$

$$P(\mathbf{x}, z) = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \widehat{P}_z(\mathbf{k}, z) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.6})$$

Donde $\mathbf{x} = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2$, $r = \|\mathbf{x}\|$ y $\mathbf{k} = \mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y$. Para los terminos gradiente y Laplaciano usando la definicion de B.1 y B.4 se obtiene:

$$\nabla u(\mathbf{x})_{far} = \nabla \sum_{k_x} \sum_{k_y} \widehat{u}(\mathbf{k}, z) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \nabla \widehat{u}(\mathbf{k}, z) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.7})$$

Derivando los terminos $\frac{\partial u_{far}}{\partial x}$ y $\frac{\partial u_{far}}{\partial y}$ se llega a:

$$\nabla u(\mathbf{x})_{far} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} (i\mathbf{k} \cdot \widehat{u}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial \widehat{u}(\mathbf{k}, z)}{\partial z}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.8})$$

$$\nabla^2 u(\mathbf{x})_{far} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} (-\|\mathbf{k}\|^2 \widehat{u}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial^2 \widehat{u}}{\partial z^2}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{B.9})$$

Luego aplicando el producto punto con una funcion complementaria, en los terminos de las ecuaciones B.8-B.9 se llega a:

$$\begin{aligned} \langle \nabla u(\mathbf{x}, z)_{far}, e^{i\mathbf{l}\cdot\mathbf{x}} \rangle &= \int \left(\left(\sum_{k_x} \sum_{k_y} i\mathbf{k} \cdot \widehat{u}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial \widehat{u}(\mathbf{k}, z)}{\partial z} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{l}\cdot\mathbf{x}} \right) d\mathbf{r} \\ &= i\mathbf{k} \cdot \widehat{u}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial \widehat{u}(\mathbf{k}, z)}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla^2 u(\mathbf{x}, z)_{far}, e^{i\mathbf{l}\cdot\mathbf{x}} \rangle &= \int \left(\sum_{k_x} \sum_{k_y} \left(-\|\mathbf{k}\|^2 \widehat{u} + \frac{\partial^2 \widehat{u}}{\partial z^2} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{l}\cdot\mathbf{x}} \right) d\mathbf{r} \\ &= -\|\mathbf{k}\|^2 \widehat{u}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial^2 \widehat{u}(\mathbf{k}, z)}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Aplicando el procedimiento anterior para los divergentes en el espacio de fourier :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, z)_{far} = \underline{i}k_x \hat{u}(\mathbf{k}, z) + \underline{i}k_y \hat{v}(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial \hat{w}(\mathbf{k}, z)}{\partial z} \quad (\text{B.12})$$

Donde los terminos \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} son las componentes de velocidad en el espacio de Fourier. Para la presion:

$$\nabla P(\mathbf{x}, z) = \underline{i}k_x P(\mathbf{k}, z) + \underline{i}k_y P(\mathbf{k}, z) + \frac{\partial P(\mathbf{k}, z)}{\partial z} \quad (\text{B.13})$$

.

Apéndice C

Anexo: Metodo Hibrido Diferencias Finitas-DFFT

Para solucionar las ecuaciones de 4.31 a 4.35 se utiliza el metodo de diferencias finitas en un esquema implicito. Aqui $ik_x \hat{P} = ik_x \frac{\hat{P}_i + \hat{P}_{i+1}}{2}$, $\frac{\partial^2 \hat{u}(\mathbf{k}, z)}{\partial z^2} = \frac{-\hat{u}_{i+1} + 2\hat{u}_i - \hat{u}_{i-1}}{-(\Delta z)^2}$, $\frac{\partial \hat{u}(\mathbf{k}, z)}{\partial z} = \frac{\hat{u}_{i+1} - \hat{u}_i}{\Delta z}$, $\frac{\partial^2 \hat{C}(\mathbf{k}, z)}{\partial z^2} = \frac{-\hat{C}_{i+1} + 2\hat{C}_i - \hat{C}_{i-1}}{-(\Delta z)^2}$.

Definimos $\eta = \frac{1}{-6\pi(\Delta z)^2}$, $\kappa = \frac{1}{-(\Delta z)^2}$.

Finalmente al discretizar las ecuaciones A.6 y 4.10 en el espacio de fourier son, el sistema de ecuaciones a resolver es:

$$\eta \hat{u}(\mathbf{k})_{i+1} + (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\eta) \hat{u}(\mathbf{k})_i + \eta \hat{u}(\mathbf{k})_{i-1} + \frac{ik_x}{12\pi} (\hat{P}(\mathbf{k})_{i+1} + \hat{P}(\mathbf{k})_i) = \hat{\rho}(\mathbf{k})_{xi} \quad (\text{C.1})$$

$$\eta \hat{v}(\mathbf{k})_{i+1} + (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\eta) \hat{v}(\mathbf{k})_i + \eta \hat{v}(\mathbf{k})_{i-1} + \frac{ik_y}{12\pi} (\hat{P}(\mathbf{k})_{i+1} + \hat{P}(\mathbf{k})_i) = \hat{\rho}(\mathbf{k})_{yi} \quad (\text{C.2})$$

$$\eta \hat{w}(\mathbf{k})_{i+1} + (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\eta) \hat{w}(\mathbf{k})_i + \eta \hat{w}(\mathbf{k})_{i-1} + \frac{1}{6\pi \Delta z} (\hat{P}(\mathbf{k})_i - \hat{P}(\mathbf{k})_{i-1}) = \hat{\rho}(\mathbf{k})_{zi} \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{ik_x}{2} (\hat{u}(\mathbf{k})_{i+1} + \hat{u}(\mathbf{k})_i) + \frac{ik_y}{2} (\hat{v}(\mathbf{k})_{i+1} + \hat{v}(\mathbf{k})_i) + \frac{1}{\Delta z} (\hat{w}(\mathbf{k})_{i+1} - \hat{w}(\mathbf{k})_i) = 0 \quad (\text{C.4})$$

Se utiliza un esquema de Cranck-Nicholson para solucionar la ecuación 4.20 para evitar una posible inestabilidad numerica.

$$\begin{aligned} & \left(\widehat{C}(\mathbf{k})_i + \Psi \kappa \widehat{C}(\mathbf{k})_{i+1} + \Psi (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\kappa) \widehat{C}(\mathbf{k})_i + \Psi \kappa \widehat{C}(\mathbf{k})_{i-1} \right)^{t+1} = \\ & \left(\widehat{C}(\mathbf{k})_i - \Psi \kappa \widehat{C}(\mathbf{k})_{i+1} - \Psi (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\kappa) \widehat{C}(\mathbf{k})_i - \Psi \kappa \widehat{C}(\mathbf{k})_{i-1} \right)^t - \Delta t \widehat{f}^t(\mathbf{k})_{Ci} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

$$\Psi = \frac{0,5 \Delta t}{Pe}$$

Ensamblando las ecuaciones C.1-C.5 de forma matricial

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{F} \quad (\text{C.6})$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_x & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{P}_x \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_y & \mathbf{0} & \mathbf{P}_y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{A}_z & \mathbf{P}_z \\ \mathbf{D}_x & \mathbf{D}_y & \mathbf{D}_z & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (\text{C.7})$$

$$\mathbf{A}_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \eta & (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\eta) & \eta & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \eta & (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\eta) & \eta & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \eta & (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\eta) & \eta \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{C.8})$$

Hay que notar que $\mathbf{A}_x = \mathbf{A}_y = \mathbf{A}_z$.

$$\mathbf{D}_x = \begin{bmatrix} \frac{ik_y}{2} & \frac{ik_y}{2} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \frac{ik_y}{2} & \frac{ik_y}{2} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{ik_y}{2} & \frac{ik_y}{2} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{ik_y}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{C.9})$$

$$\mathbf{D}_x = \mathbf{D}_y.$$

$$\mathbf{D}_z = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\Delta z} & \frac{1}{\Delta z} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Delta z} & \frac{1}{\Delta z} & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & -\frac{1}{\Delta z} & \frac{1}{\Delta z} & \dots & \frac{1}{\Delta z} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & -\frac{1}{\Delta z} \end{bmatrix} \quad (\text{C.10})$$

$$\mathbf{P}_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \frac{ik_y}{12\pi} & \frac{ik_y}{12\pi} & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \frac{ik_y}{12\pi} & \frac{ik_y}{12\pi} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{C.11})$$

$$\mathbf{P}_z = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Delta z} & \frac{1}{\Delta z} & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & -\frac{1}{\Delta z} & \frac{1}{\Delta z} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{C.12})$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{x\,far} \\ \mathbf{U}_{y\,far} \\ \mathbf{U}_{z\,far} \\ \mathbf{P}_{far} \end{pmatrix} \quad (\text{C.13})$$

Donde $\mathbf{U}_{x\,far} = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k})_{1, \dots, \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k})_{i+1, \dots}$, $\mathbf{U}_{y\,far} = \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{k})_{1, \dots, \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{k})_{i+1, \dots}$, $\mathbf{U}_{z\,far} = \hat{\mathbf{w}}(\mathbf{k})_{1, \dots, \hat{\mathbf{w}}(\mathbf{k})_{i+1, \dots}$

y \mathbf{P}_{far} son las variables a encontrar.

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{\mathbf{x}far} \\ \mathbf{F}_{\mathbf{y}far} \\ \mathbf{F}_{\mathbf{z}far} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (\text{C.14})$$

Donde $\mathbf{F}_{\mathbf{x}far}$, $\mathbf{F}_{\mathbf{y}far}$, $\mathbf{F}_{\mathbf{z}far}$ son vectores a que contienen el valor de $\hat{\rho}(\mathbf{k})_{xi}$, $\hat{\rho}(\mathbf{k})_{yi}$, $\hat{\rho}(\mathbf{k})_{zi}$ y las condiciones de frontera en el canal $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, -H)_{far} = -\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, -H)_{near}$, $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, H)_{far} = -\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, H)_{near}$. El sistema de ecuaciones C.6 se soluciona mediante el metodo descomposicion LU. Una vez resuelto el sistema propuesto en la ecuación C.6, se devuelve al espacio Real mediante una transformada inversa de Fourier ecuación B.1, para luego interpolar el valor de $\mathbf{u}(\mathbf{x}, z)_{far}$ en todos los beads y trazadores mediante una interpolación de Lagrange en 3 dimensiones [205] y usando 3 nodos de la malla por cada punto discreto (bead) y obtener la ecuación 4.24 en todos los puntos discretos (beads y trazadores) y para todos los nodos de la malla. Una vez obtenidos el valor de la 4.24 en la malla, se resuelve las ecuaciones C.5 en forma matricial.

$$(\mathbf{I} + \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}^{t+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}^t - \mathbf{F}_c^t \quad (\text{C.15})$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\kappa) & \kappa & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \kappa & (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\kappa) & \kappa & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \kappa & (\|\mathbf{k}\|^2 - 2\kappa) & \dots \end{bmatrix} \quad (\text{C.16})$$

$$\mathbf{F}_c^t = \begin{pmatrix} \hat{f}(\mathbf{k})_{c1} \\ \dots \\ \hat{f}(\mathbf{k})_{ci} \\ \dots \\ \hat{f}(\mathbf{k})_{cN} \end{pmatrix} \quad (\text{C.17})$$

$$\mathbf{C}^t = \begin{pmatrix} \widehat{C}(\mathbf{k})_1^t \\ \dots \\ \widehat{C}(\mathbf{k})_i^t \\ \dots \\ \widehat{C}(\mathbf{k})_N^t \end{pmatrix} \quad (\text{C.18})$$

La ecuacion C.14 se soluciona mediante el metodo de matrices tridiagonales.

Bibliografía

- [1] A. Sokolov, S. Zhou, O. D. Lavrentovich, and I. S. Aranson, “Individual behavior and pairwise interactions between microswimmers in anisotropic liquid,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2015.
- [2] A. Zöttl and H. Stark, “Emergent behavior in active colloids,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 28, no. 25, 2016.
- [3] S. J. Ebbens and J. R. Howse, “In pursuit of propulsion at the nanoscale,” *Soft Matter*, vol. 6, no. 4, p. 726, 2010. [Online]. Available: <http://xlink.rsc.org/?DOI=b918598d>
- [4] X. Yang, M. L. Manning, and M. C. Marchetti, “Aggregation and Segregation of Confined Active Particles,” *Soft Matter*, vol. 672, no. 10, pp. 6477–6484, 2014. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1403.0697>
- [5] É. Fodor and M. Cristina Marchetti, “The statistical physics of active matter: From self-catalytic colloids to living cells,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 504, no. ii, pp. 106–120, 2018.
- [6] D. Saintillan and M. J. Shelley, “Instabilities and pattern formation in active particle suspensions: Kinetic theory and continuum simulations,” *Physical Review Letters*, vol. 100, no. 17, pp. 1–4, 2008.
- [7] D. Levis, “Effective thermodynamics in systems of active particles Active “ particles ”,” pp. 15–18, 2015.
- [8] H. H. Wensink and H. Löwen, “Aggregation of self-propelled colloidal rods near confining walls,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 78, no. 3, pp. 20–23, 2008.
- [9] G. Kokot, S. Das, R. G. Winkler, G. Gompper, I. S. Aranson, and A. Snezhko, “Active turbulence in a gas of self-assembled spinners,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 0, p. 201710188, 2017. [Online]. Available: <http://www.pnas.org/lookup/doi/10.1073/pnas.1710188114>

-
- [10] S. P. Thampi, A. Doostmohammadi, T. N. Shendruk, R. Golestanian, and J. M. Yeomans, “Active micromachines: Microfluidics powered by mesoscale turbulence,” *Science advances*, vol. 2, no. 7, p. e1501854, 2016.
- [11] F. R. Koessel and S. Jabbari-Farouji, “Controlling stability and transport of magnetic microswimmers by an external field,” *arXiv.org*, vol. arXiv:1802, 2018.
- [12] S. C. Takatori and J. F. Brady, “Towards a thermodynamics of active matter,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 91, no. 3, 2015.
- [13] A. Decoene, S. Martin, and B. Maury, “Microscopic Modelling of Active Bacterial Suspensions,” *Mathematical Modelling of Natural Phenomena*, vol. 6, no. 5, pp. 98–129, 2011. [Online]. Available: <http://www.mmnp-journal.org/10.1051/mmnp/20116506>
- [14] E. Lushi, R. E. Goldstein, and M. J. Shelley, “Collective chemotactic dynamics in the presence of self-generated fluid flows,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 86, no. 4, pp. 2–5, 2012.
- [15] G. Gonnella, D. Marenduzzo, A. Suma, and A. Tiribocchi, “Motility-induced phase separation and coarsening in active matter,” *Comptes Rendus Physique*, vol. 16, no. 3, pp. 316–331, 2015. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.crhy.2015.05.001>
- [16] F. Ginot, I. Theurkauff, F. Detcheverry, C. Ybert, and C. Cottin-Bizonne, “Aggregation-fragmentation and individual dynamics of active clusters,” *Nature Communications*, vol. 9, no. 1, 2018. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/s41467-017-02625-7>
- [17] M.-j. Huang, J. Scho, and R. Kapral, “Chemotactic and hydrodynamic effects on collective dynamics of self-diffusiophoretic Janus motors Chemotactic and hydrodynamic effects on collective dynamics of self-diffusiophoretic Janus motors,” *New Journal of Physics*, pp. 0–13, 2017.
- [18] G. Ariel, A. Be’Er, and A. Reynolds, “Chaotic Model for Lévy Walks in Swarming Bacteria,” *Physical Review Letters*, vol. 118, no. 22, pp. 1–6, 2017.
- [19] A. Zöttl and H. Stark, “Emergent behavior in active colloids,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 28, no. 25, 2016.
- [20] P. H. Chavanis, “A stochastic Keller-Segel model of chemotaxis,” *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol. 15, no. 1, pp. 60–70, 2010.

- [21] J. Elgeti, R. G. Winkler, and G. Gompper, “Physics of microswimmers - Single particle motion and collective behavior: A review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 78, no. 5, 2015.
- [22] E. F. Keller and L. A. Segel, “Model for chemotaxis,” *Journal of Theoretical Biology*, vol. 30, no. 2, pp. 225–234, 1971.
- [23] E. W. Burkholder and J. F. Brady, “Tracer diffusion in active suspensions,” *Physical Review E*, vol. 95, no. 5, 2017.
- [24] J. Dunkel, S. Heidenreich, K. Drescher, H. H. Wensink, M. Bär, and R. E. Goldstein, “Fluid dynamics of bacterial turbulence.” *Physical review letters*, vol. 110, no. 22, p. 228102, 2013.
- [25] B. Sabass, H. A. Stone, and J. W. Shaevitz, “Collective force generation by groups of migrating bacteria,” 2017. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1701.00524>
- [26] F. R. Koessel and S. Jabbari-Farouji, “Controlling stability and transport of magnetic microswimmers by an external field,” *arXiv.org*, 2018. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1802.07364>
- [27] A. Be’er and R. M. Harshey, “Collective motion of surfactant-producing bacteria imparts superdiffusivity to their upper surface,” *Biophysical Journal*, vol. 101, no. 5, pp. 1017–1024, 2011. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.bpj.2011.07.019>
- [28] O. Pohl, “Chemotaxis of self-phoretic active particles and bacteria,” Ph.D. dissertation, 2016.
- [29] H. C. Berg and D. A. Brown, “Chemotaxis in *Escherichia coli* analysed by three-dimensional tracking,” *Nature*, vol. 239, no. 5374, pp. 500–504, 1972.
- [30] D. L. Koch and G. Subramanian, “Collective Hydrodynamics of Swimming Microorganisms: Living Fluids,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 43, no. 1, pp. 637–659, 2011. [Online]. Available: <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-fluid-121108-145434>
- [31] J. P. Hernandez-Ortiz, J. J. De Pablo, and M. D. Graham, “Fast computation of many-particle hydrodynamic and electrostatic interactions in a confined geometry,” *Physical Review Letters*, vol. 98, no. 14, pp. 1–4, 2007.
- [32] J. P. Hernandez-Ortiz, P. T. Underhill, and M. D. Graham, “Dynamics of confined suspensions of swimming particles,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 21, no. 20, 2009.

- [33] T. Ishikawa and T. J. Pedley, “Diffusion of swimming model micro-organisms in a semi-dilute suspension,” *J. Fluid Mech*, vol. 588, pp. 437–462, 2016.
- [34] J. P. Hernandez-Ortiz, C. G. Stoltz, and M. D. Graham, “Transport and collective dynamics in suspensions of confined swimming particles,” *Physical Review Letters*, vol. 95, no. 20, pp. 1–4, 2005.
- [35] J. Brady, “Stokesian Dynamics,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 20, no. 1, pp. 111–157, 1988. [Online]. Available: <http://fluid.annualreviews.org/cgi/doi/10.1146/annurev.fluid.20.1.111>
- [36] A. Chertock, K. Fellner, A. Kurganov, A. Lorz, and P. A. Markowich, “Sinking, merging and stationary plumes in a coupled chemotaxis-fluid model: A high-resolution numerical approach,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 694, pp. 155–190, 2012.
- [37] X. Chen, X. Dong, A. Be’Er, H. L. Swinney, and H. P. Zhang, “Scale-invariant correlations in dynamic bacterial clusters,” *Physical Review Letters*, vol. 108, no. 14, pp. 1–5, 2012.
- [38] S. K. S. J. Karrila, *Microhydrodynamics: Principles and Selected Application*. Reading, Massachusetts: Dover Publications 1th Edition, 1991.
- [39] J. F. M. Elisabeth Guazzelli, *A Physical Introduction to Suspension Dynamics (Cambridge Texts in Applied Mathematics)*. Reading, Massachusetts: Cambridge University Press; 1th Edition, 2012.
- [40] I. S. Aranson, A. Sokolov, J. O. Kessler, and R. E. Goldstein, “Model for dynamical coherence in thin films of self-propelled microorganisms,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 75, no. 4, pp. 1–4, 2007.
- [41] A. Sokolov, I. S. Aranson, J. O. Kessler, and R. E. Goldstein, “Concentration dependence of the collective dynamics of swimming bacteria,” *Physical Review Letters*, vol. 98, no. 15, pp. 1–4, 2007.
- [42] A. Sokolov and I. S. Aranson, “Reduction of viscosity in suspension of swimming bacteria,” *Physical Review Letters*, vol. 103, no. 14, pp. 2–5, 2009.
- [43] B. Haines, A. Sokolov, I. Aranson, L. Berlyand, and D. Karpeev, “Three-dimensional model for the effective viscosity of bacterial suspensions,” *Phys. Rev. E*, vol. 80, no. 4, pp. 1–7, 2009. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.80.041922>

-
- [44] K. C. Leptos, J. S. Guasto, J. P. Gollub, A. I. Pesci, and R. E. Goldstein, “Dynamics of Enhanced Tracer Diffusion in Suspensions of Swimming Eukaryotic Microorganisms,” *Physical Review Letters*, vol. 103, no. 19, 2009.
- [45] R. Stocker and J. R. Seymour, “Ecology and Physics of Bacterial Chemotaxis in the Ocean,” *Microbiology and Molecular Biology Reviews*, vol. 76, no. 4, pp. 792–812, 2012. [Online]. Available: <http://mmbr.asm.org/cgi/doi/10.1128/MMBR.00029-12>
- [46] R. Colin and V. Sourjik, “Chemotactic behavior of *Escherichia coli* at high cell density,” 2018. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1101/402289>
- [47] G. P. Alexander and J. M. Yeomans, “Dumb-bell swimmers,” *Epl*, vol. 83, no. 3, pp. 1–6, 2008.
- [48] D. Krishnamurthy and G. Subramanian, “Collective motion in a suspension of microswimmers that run-and-tumble and rotary diffuse,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 781, pp. 422–466, 2015.
- [49] M. D. Graham, *Microhydrodynamics, Brownian Motion, and Complex Fluids*. Reading, Massachusetts: Cambridge University Press, 2018.
- [50] L. G. Leal, *Advanced Transport Phenomena*. Reading, Massachusetts: Cambridge University Press, 2007.
- [51] E. Lauga and T. R. Powers, “The hydrodynamics of swimming microorganisms,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 72, no. 9, 2009.
- [52] L. I. Z. Emmanuel G. Sinaiski, *Statistical Microhydrodynamics*. New York: Wiley-VCH 1th Edition, 2008.
- [53] M. Sidortsov, Y. Morgenstern, and A. Be’Er, “Role of tumbling in bacterial swarming,” *Physical Review E*, vol. 96, no. 2, pp. 1–7, 2017.
- [54] J. Elgeti, R. G. Winkler, and G. Gompper, “Physics of microswimmers - Single particle motion and collective behavior: A review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 78, no. 5, 2015.
- [55] J.R.Blake, “A spherical envelope approach to ciliary propulsion,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 46, pp. 199–208, 1971.
- [56] B. Hu and Y. Tu, “Behaviors and Strategies of Bacterial Navigation in Chemical and Nonchemical Gradients,” *PLoS Computational Biology*, vol. 10, no. 6, 2014.

- [57] S. J. Ebbens, “Active colloids: Progress and challenges towards realising autonomous applications,” *Current Opinion in Colloid and Interface Science*, vol. 21, pp. 14–23, 2016. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cocis.2015.10.003>
- [58] W. F. Paxton, A. Sen, and T. E. Mallouk, “Motility of catalytic nanoparticles through self-generated forces,” *Chemistry - A European Journal*, vol. 11, no. 22, pp. 6462–6470, 2005.
- [59] J. K. Dhon, *An Introduction to Dynamics of Colloids*. Reading, Massachusetts: Elsevier Science, 1996.
- [60] R. Golestanian and S. Ramaswamy, “Active Matter,” vol. 119, pp. 2012–2013, 2013.
- [61] R. Dillon, L. Fauci, and D. Gaver, “A microscale model of bacterial swimming, chemotaxis and substrate transport,” *Journal of Theoretical Biology*, vol. 177, no. 4, pp. 325–340, 1995.
- [62] H. H. Wensink, J. Dunkel, S. Heidenreich, K. Drescher, R. E. Goldstein, H. Lowen, and J. M. Yeomans, “Meso-scale turbulence in living fluids,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 109, no. 36, pp. 14 308–14 313, 2012. [Online]. Available: <http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1202032109>
- [63] D. Saintillan, E. Darve, and E. S. Shaqfeh, “A smooth particle-mesh Ewald algorithm for Stokes suspension simulations: The sedimentation of fibres,” *Physics of Fluids*, vol. 17, no. 3, pp. 1–21, 2005.
- [64] Y. Deleuze, C. Y. Chiang, M. Thiriet, and T. W. Sheu, “Numerical study of plume patterns in a chemotaxis-diffusion-convection coupling system,” *Computers and Fluids*, vol. 126, pp. 58–70, 2016.
- [65] H. G. Lee and J. Kim, “Numerical investigation of falling bacterial plumes caused by bioconvection in a three-dimensional chamber,” *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, vol. 52, pp. 120–130, 2015. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.euromechflu.2015.03.002>
- [66] H. P. Zhang, A. Be’er, E.-L. Florin, and H. L. Swinney, “Collective motion and density fluctuations in bacterial colonies,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 107, no. 31, pp. 13 626–13 630, 2010. [Online]. Available: <http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1001651107>
- [67] D. B. Kearns, “A field guide to bacterial swarming motility,” *Nature Reviews Microbiology*, vol. 8, no. 9, pp. 634–644, 2010. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/nrmicro2405>

- [68] J. S. Guasto, R. Rusconi, and R. Stocker, “Fluid Mechanics of Planktonic Microorganisms,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 44, no. 1, pp. 373–400, 2012. [Online]. Available: <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-fluid-120710-101156>
- [69] V. Magar, T. Goto, and T. J. Pedley, “Nutrient uptake by a self-propelled steady squirmer,” *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, vol. 56, no. 1, pp. 65–91, 2003.
- [70] H. Kurtuldu, J. S. Guasto, K. A. Johnson, and J. P. Gollub, “Enhancement of biomixing by swimming algal cells in two-dimensional films,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 108, no. 26, pp. 10 391–10 395, 2011. [Online]. Available: <http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1107046108>
- [71] S. Rafai, L. Jibuti, and P. Peyla, “Effective viscosity of microswimmer suspensions,” *Physical Review Letters*, vol. 104, no. 9, 2010.
- [72] C. Douarche, A. Buguin, H. Salman, and A. Libchaber, “E. Coli and Oxygen: A motility transition,” *Physical Review Letters*, vol. 102, no. 19, pp. 2–5, 2009.
- [73] X. L. Wu and A. Libchaber, “Particle diffusion in a quasi-two-dimensional bacterial bath.” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, no. 13, pp. 3017–20, 2000. [Online]. Available: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/11177879>
- [74] I. Llopis and I. Pagonabarraga, “Dynamic regimes of hydrodynamically coupled self-propelling particles,” *Europhysics Letters*, vol. 75, no. 6, pp. 999–1005, 2006.
- [75] H. C. Berg, *E. coli in Motion*, 1st ed. New York: Springer, 2003.
- [76] H. C. Berg and D. A. Brown, “Chemotaxis in *Escherichia coli* analysed by three-dimensional tracking,” *Nature*, vol. 239, no. 5374, pp. 500–504, 1972.
- [77] H. C. Berg, “How Bacteria Swim,” *Scientific American*, vol. 233, no. 2, pp. 36–44, 1975.
- [78] Y. Meir, V. Jakovljevic, O. Oleksiuk, V. Sourjik, and N. S. Wingreen, “Precision and kinetics of adaptation in bacterial chemotaxis,” *Biophysical Journal*, vol. 99, no. 9, pp. 2766–2774, 2010. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.bpj.2010.08.051>
- [79] N. H. Mendelson, A. Bourque, K. Wilkening, K. R. Anderson, and J. C. Watkins, “Organized cell swimming motions in *Bacillus subtilis* colonies: Patterns of short-lived whirls and jets,” *Journal of Bacteriology*, vol. 181, no. 2, pp. 600–609, 1999.

- [80] B. Ezhilan, A. A. Pahlavan, and D. Saintillan, “Chaotic dynamics and oxygen transport in thin films of aerotactic bacteria,” *Physics of Fluids*, vol. 24, no. 9, 2012.
- [81] J. Taktikos, V. Zaburdaev, and H. Stark, “Modeling a self-propelled autochemotactic walker,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 84, no. 4, pp. 1–11, 2011.
- [82] H. Ma and M. D. Graham, “Theory of shear-induced migration in dilute polymer solutions near solid boundaries,” *Physics of Fluids*, vol. 17, no. 8, p. 083103, 2005.
- [83] H. Ma, “Dynamics of Flowing Polymer Solutions Under Confinement,” Ph.D. dissertation, 2007. [Online]. Available: <http://grahamgroup.che.wisc.edu/pub/Hongbo.Ma.Thesis.pdf>
- [84] J. Bleibel, “Ewald sum for hydrodynamic interactions with periodicity in two dimensions,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 45, no. 22, 2012.
- [85] R. M. Jendrejack, D. C. Schwartz, M. D. Graham, and J. J. De Pablo, “Effect of confinement on DNA dynamics in microfluidic devices,” *Journal of Chemical Physics*, vol. 119, no. 2, pp. 1165–1173, 2003.
- [86] H. Wioland, E. Lushi, and R. E. Goldstein, “Directed collective motion of bacteria under channel confinement,” *New Journal of Physics*, vol. 18, no. 7, pp. 1–11, 2016.
- [87] A. Costanzo, R. Di Leonardo, G. Ruocco, and L. Angelani, “Transport of self-propelling bacteria in micro-channel flow,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 24, no. 6, 2012.
- [88] C. Y. Lee, C. L. Chang, Y. N. Wang, and L. M. Fu, “Microfluidic mixing: A review,” *International Journal of Molecular Sciences*, vol. 12, no. 5, pp. 3263–3287, 2011.
- [89] J. P. Hernández-Ortiz, J. De Pablo, J. P. Hernandez-Ortiz, H. Ma, J. J. De Pablo, and M. D. Graham, “Concentration distributions during flow of confined flowing polymer solutions at finite concentration: Slit and grooved channel Genome approach to understand and characterize Arboviruses and re-emergent Tropical Diseases View project Modeling and Simulati,” Tech. Rep. 3, 2008. [Online]. Available: <https://www.researchgate.net/publication/228367319>
- [90] R. Rusconi, M. Garren, and R. Stocker, “Microfluidics Expanding the Frontiers of Microbial Ecology,” *Annual Review of Biophysics*, vol. 43, no. 1, pp. 65–91, 2014. [Online]. Available: <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-biophys-051013-022916>

- [91] J. Zhuang, R. W. Carlsen, and M. Sitti, “PH-taxis of biohybrid microsystems,” *Scientific Reports*, vol. 5, pp. 1–13, 2015. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/srep11403>
- [92] D. J. Earl, C. M. Pooley, J. F. Ryder, I. Bredberg, and J. M. Yeomans, “Modeling microscopic swimmers at low Reynolds number,” *Journal of Chemical Physics*, vol. 126, no. 6, 2007.
- [93] R. W. Carlsen and M. Sitti, “Bio-hybrid cell-based actuators for microsystems,” *Small*, vol. 10, no. 19, pp. 3831–3851, 2014.
- [94] D. Saintillan and M. J. Shelley, “Active suspensions and their nonlinear models,” *Comptes Rendus Physique*, vol. 14, no. 6, pp. 497–517, 2013. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.crhy.2013.04.001>
- [95] J. P. Hernandez-Ortiz, “A novel approach for electrokinetic phenomena in soft matter,” *Dyna*, vol. 79, pp. 105–113, 2012.
- [96] S. E. Spagnolie, *Complex Fluids in Biological Systems Experiment, Theory, and Computation*. New York: Springer, 2015.
- [97] G. Taylor, “Analysis of the swimming of microscopic organisms,” pp. 447–461, 1951.
- [98] K. Drescher, J. Dunkel, L. H. Cisneros, S. Ganguly, and R. E. Goldstein, “Fluid dynamics and noise in bacterial cell – cell and cell – surface scattering,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 108, no. 27, pp. 10 940–10 945, 2011.
- [99] J. S. Guasto, R. Rusconi, and R. Stocker, “Fluid Mechanics of Planktonic Microorganisms,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 44, no. 1, pp. 373–400, 2012. [Online]. Available: <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-fluid-120710-101156>
- [100] J. Elgeti, R. G. Winkler, and G. Gompper, “Physics of microswimmers - Single particle motion and collective behavior: A review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 78, no. 5, 2015.
- [101] S. D. Ryan, B. M. Haines, L. V. Berlyand, F. Ziebert, and I. S. Aranson, “Viscosity of Bacterial Suspensions: Hydrodynamic Interactions and Self-Induced Noise,” *Physical Review E*, vol. 83, no. 5, p. 50904, 2011.
- [102] M. Potomkin, S. D. Ryan, and L. Berlyand, “Effective rheological properties in semi-dilute bacterial suspensions,” *Bulletin of Mathematical Biology*, vol. 78, no. 3, pp. 580–615, 2016.

- [103] L. H. Cisneros, R. Cortez, C. Dombrowski, R. E. Goldstein, and J. O. Kessler, “Fluid dynamics of self-propelled microorganisms, from individuals to concentrated populations,” *Animal Locomotion*, vol. 43, no. 5, pp. 737–753, 2007.
- [104] A. Creppy, O. Praud, X. Druart, P. L. Kohnke, and F. Plouraboué, “Turbulence of swarming sperm,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 92, no. 3, pp. 1–11, 2015.
- [105] A. E. Patteson, A. Gopinath, and P. E. Arratia, “The propagation of active-passive interfaces in bacterial swarms,” *Nature Communications*, vol. 9, no. 1, 2018. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/s41467-018-07781-y>
- [106] S. B. Pope, *Turbulent Flows*. Reading, Massachusetts: Cambridge University Press, 2012.
- [107] D. Saintillan and M. J. Shelley, “Emergence of coherent structures and large-scale flows in motile suspensions,” *Journal of The Royal Society Interface*, vol. 9, no. 68, pp. 571–585, 2012. [Online]. Available: <http://rsif.royalsocietypublishing.org/cgi/doi/10.1098/rsif.2011.0355>
- [108] M. K. Verma, A. Kumar, P. Kumar, S. Barman, A. G. Chatterjee, R. Samtaney, and R. A. Stepanov, “Energy Spectra and Fluxes in Dissipation Range of Turbulent and Laminar Flows,” *Fluid Dynamics*, vol. 53, no. 6, pp. 862–873, 2019. [Online]. Available: <https://www.researchgate.net/publication/316955375http://arxiv.org/abs/1705.04917>
- [109] G. Wang, D. Wan, C. Peng, K. Liu, and L.-p. Wang, “LBM study of aggregation of monosized spherical particles in homogeneous isotropic turbulence,” *Chemical Engineering Science*, vol. 201, pp. 201–211, 2019. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.03.004>
- [110] D. Saintillan and M. J. Shelley, “Instabilities, pattern formation, and mixing in active suspensions,” *Physics of Fluids*, vol. 20, no. 12, p. 123304, 2008. [Online]. Available: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3041776>
- [111] D. F. Hinz, A. Panchenko, T.-Y. Kim, and E. Fried, “Motility versus fluctuations in mixtures of self-propelled and passive agents,” *Soft Matter*, vol. 10, pp. 9082–9089, 2014. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1403.8114><http://dx.doi.org/10.1039/c4sm01562b>
- [112] D. Saintillan and S. M.J., “Orientational order and instabilities in suspensions of self-locomoting rods,” *Physical Review Letters*, vol. 99, no. 5, pp. 1–4, 2007.

- [113] Z. Liu, “Turbulence in Active Matters,” p. 12, 2018. [Online]. Available: <http://guava.physhttp://guava.physics.uiuc.edu/{%}7B{~}{%}7Dni>
- [114] H. Search, C. Journals, A. Contact, M. Iopscience, I. P. Address, A. M. Lee, and T. A. Manuscript, “A 2-D suspension of active agents: the role of fluid mediated interactions,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 29, no. 11, 2017.
- [115] Y. Zhang, “BROWNIAN DYNAMICS SIMULATION OF DNA IN COMPLEX GEOMETRIES,” Ph.D. dissertation, 2011.
- [116] P. T. Underhill, J. P. Hernandez-Ortiz, and M. D. Graham, “Diffusion and spatial correlations in suspensions of swimming particles,” *Physical Review Letters*, vol. 100, no. 24, pp. 1–4, 2008.
- [117] H. C. Berg and H. C. Berg, “Behavior of motile Bacteria,” *Genetic Analysis*, pp. 24–29, 2000.
- [118] G. H. Wadhams and J. P. Armitage, “Making sense of it all: Bacterial chemotaxis,” *Nature Reviews Molecular Cell Biology*, vol. 5, no. 12, pp. 1024–1037, 2004.
- [119] D. F. Blair, “How Bacteria Sense and Swim,” *Annual Review of Microbiology*, vol. 49, no. 1, pp. 489–522, 1995. [Online]. Available: <http://micro.annualreviews.org/cgi/doi/10.1146/annurev.micro.49.1.489>
- [120] N. W. Frankel, W. Pontius, Y. S. Dufour, J. Long, L. Hernandez-Nunez, and T. Emonet, “Adaptability of non-genetic diversity in bacterial chemotaxis,” *eLife*, vol. 3, no. October2014, pp. 1–30, 2014.
- [121] N. Vladimirov, L. Løvdok, D. Lebiedz, and V. Sourjik, “Dependence of bacterial chemotaxis on gradient shape and adaptation rate,” *PLoS Computational Biology*, vol. 4, no. 12, 2008.
- [122] J. Ainley, S. Durkin, R. Embid, P. Boindala, and R. Cortez, “The method of images for regularized Stokeslets,” *Journal of Computational Physics*, vol. 227, no. 9, pp. 4600–4616, 2008.
- [123] M. Kong, Y. Wu, G. Li, and R. G. Larson, “A bead-spring model for running and tumbling of flagellated swimmers: detailed predictions compared to experimental data for *E. coli*,” *Soft Matter*, vol. 11, no. 8, pp. 1572–1581, 2015. [Online]. Available: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C4SM02437K>
- [124] L. E. E. A. Segel, “Incorporation of Receptor Kinetics into- a Model for Bacterial Chemotaxis,” *Compare A Journal Of Comparative Education*, pp. 23–42, 1976.

- [125] B. W. Andrews, T. M. Yi, and P. A. Iglesias, “Optimal noise filtering in the chemotactic response of *Escherichia coli*,” *PLoS Computational Biology*, vol. 2, no. 11, pp. 1407–1418, 2006.
- [126] N. Barkai and S. Leibler, “Robustness in simple biochemical networks,” *nature*, vol. 387, no. 6636, pp. 913–917, 1997.
- [127] Y. Tu, T. S. Shimizu, and H. C. Berg, “Modeling the chemotactic response of *Escherichia coli* to time-varying stimuli,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 105, no. 39, pp. 14 855–14 860, 2008. [Online]. Available: <http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.0807569105>
- [128] A. Sengupta, S. Van Teeffelen, and H. Löwen, “Dynamics of a microorganism moving by chemotaxis in its own secretion,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 80, no. 3, 2009.
- [129] H. Mohammadi, B. Eस्कандариун, and A. Najafi, “A stochastic micro-machine inspired by bacterial chemotaxis,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 29, no. 1, p. 15102, 2017. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/29/1/015102>
- [130] F. Matthäus, M. Jagodič, and J. Dobnikar, “*E. coli* superdiffusion and chemotaxis-search strategy, precision, and motility,” *Biophysical Journal*, vol. 97, no. 4, pp. 946–957, 2009.
- [131] L. Jiang, Q. Ouyang, and Y. Tu, “Quantitative modeling of *Escherichia coli* chemotactic motion in environments varying in space and time,” *PLoS Computational Biology*, vol. 6, no. 4, 2010.
- [132] J. Zhuang, B. W. Park, and M. Sitti, “Propulsion and Chemotaxis in Bacteria-Driven Microswimmers,” *Advanced Science*, vol. 4, no. 9, 2017.
- [133] F. Matth, “A Hybrid Model for *E. coli* Chemotaxis: From Signaling Pathway to Pattern Formation,” *Managing Complexity, Reducing Perplexity*, vol. 67, pp. 37–44, 2014. [Online]. Available: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-319-03759-2>
- [134] H. G. Othmer, X. Xin, and C. Xue, *Excitation and adaptation in bacteria-a model signal transduction system that controls taxis and spatial pattern formation*, 2013, vol. 14, no. 5.
- [135] T. Curk, D. Marenduzzo, and J. Dobnikar, “Chemotactic Sensing towards Ambient and Secreted Attractant Drives Collective Behaviour of *E. coli*,” *PLoS ONE*, vol. 8, no. 10, 2013.

- [136] O. Pohl and H. Stark, “Self-phoretic active particles interacting by diffusiophoresis: A numerical study of the collapsed state and dynamic clustering,” *European Physical Journal E*, vol. 38, no. 8, p. 93, 2015.
- [137] L. Segel, “A Theoretical Study of Receptor Mechanisms in Bacterial Chemotaxis ,” *SIAM journal on applied mathematics*, vol. 32, no. 3, pp. 653–665, 1977.
- [138] R. Šimkus, R. Baronas, and Ž. Ledas, “A multi-cellular network of metabolically active E. coli as a weak gel of living Janus particles,” *Soft Matter*, vol. 9, no. 17, p. 4489, 2013. [Online]. Available: <http://xlink.rsc.org/?DOI=c3sm27786k>
- [139] T. V. Kasyap and D. L. Koch, “Chemotaxis driven instability of a confined bacterial suspension,” *Physical Review Letters*, vol. 108, no. 3, 2012.
- [140] N. H. Mendelson, A. Bourque, K. Wilkening, K. R. Anderson, and J. C. Watkins, “Organized cell swimming motions in *Bacillus subtilis* colonies: Patterns of short-lived whirls and jets,” *Journal of Bacteriology*, vol. 181, no. 2, pp. 600–609, 1999.
- [141] D. Saintillan and M. J. Shelley, “Active suspensions and their nonlinear models,” *Comptes Rendus Physique*, vol. 14, no. 6, pp. 497–517, 2013. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.crhy.2013.04.001>
- [142] M. Rein, N. Heinß, F. Schmid, and T. Speck, “Collective behavior of quorum-sensing run-and-tumble particles in confinement,” 2016. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1601.01512><http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.058102>
- [143] J. Urzay, A. Doostmohammadi, and J. M. Yeomans, “Multi-scale statistics of turbulence motorized by active matter,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 822, pp. 762–773, 2017.
- [144] M. E. Cates and F. C. MacKintosh, “Active soft matter,” *Soft Matter*, vol. 7, no. 7, p. 3050, 2011. [Online]. Available: <http://xlink.rsc.org/?DOI=c1sm90014e>
- [145] T. Vicsek and A. Zafeiris, “Collective motion,” *Physical Review Letters*, vol. 110, no. 22, pp. 1–85, 2010. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1010.5017><http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2012.03.004>
- [146] M. Paoluzzi, R. Di Leonardo, and L. Angelani, “Effective run-and-tumble dynamics of bacteria baths,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 25, no. 41, 2013.
- [147] R. Mandal, P. J. Bhuyan, P. Chaudhuri, M. Rao, and C. Dasgupta, “Glassy swirls of active dumbbells,” *Physical Review E*, vol. 96, no. 4, 2017.

- [148] S. Universit, L. F. Cugliandolo, P. Digregorio, G. Gonnella, and A. Suma, “Phase Coexistence in Two-Dimensional Passive and Active Dumbbell Systems,” *Physical Review Letters*, vol. 268002, no. December, pp. 1–6, 2017.
- [149] B. Robertson, M. J. Huang, J. X. Chen, and R. Kapral, “Synthetic Nanomotors: Working Together through Chemistry,” *Accounts of Chemical Research*, vol. 51, no. 10, pp. 2355–2364, 2018.
- [150] F. Meng, D. Matsunaga, and R. Golestanian, “Clustering of Magnetic Swimmers in a Poiseuille Flow,” *Physical Review Letters*, vol. 120, no. 18, oct 2018. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1710.08339><http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.188101>
- [151] B. Robertson, H. Stark, and R. Kapral, “Collective orientational dynamics of pinned chemically-propelled nanorotors,” *Chaos*, vol. 28, no. 4, 2018.
- [152] T. C. Adhyapak and S. Jabbari-Farouji, “Flow properties and hydrodynamic interactions of rigid spherical microswimmers,” *Physical Review E*, vol. 96, no. 5, pp. 42–48, 2017.
- [153] J. W. Swan, J. F. Brady, R. S. Moore, L. Dooling, N. Hoh, J. Choi, and R. Zia, “Modeling hydrodynamic self-propulsion with Stokesian Dynamics. Or teaching Stokesian Dynamics to swim,” *Physics of Fluids*, vol. 23, no. 7, p. 071901, 2011.
- [154] T. C. Adhyapak and S. Jabbari-Farouji, “Ewald sum for hydrodynamic interactions of rigid spherical microswimmers,” *Journal of Chemical Physics*, vol. 149, no. 14, 2018.
- [155] B. J. Durlofsky, L. and B. G., “Dynamic simulation of hydrodynamically interacting dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 195, no. 1987, pp. 21–49, 1987.
- [156] D. O. Pushkin and J. M. Yeomans, “Fluid mixing by curved trajectories of microswimmers,” *Physical Review Letters*, vol. 111, no. 18, pp. 1–5, 2013.
- [157] A. Baskaran and M. C. Marchetti, “Statistical mechanics and hydrodynamics of bacterial suspensions,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 106, no. 37, pp. 15 567–15 572, 2009.
- [158] P. Romanczuk, U. Erdmann, H. Engel, and L. Schimansky-Geier, “Beyond the Keller-Segel model,” *European Physical Journal: Special Topics*, vol. 157, no. 1, pp. 61–77, 2008.

- [159] P. Romanczuk, M. Bär, W. Ebeling, B. Lindner, and L. Schimansky-Geier, “Active Brownian particles,” *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 202, no. 1, pp. 1–162, 2012.
- [160] M. Ramia, D. L. Tullock, and N. Phan-Thien, “The role of hydrodynamic interaction in the locomotion of microorganisms,” *Biophysical Journal*, vol. 65, no. 2, pp. 755–778, 1993.
- [161] S. E. Spagnolie and E. Lauga, “The optimal elastic flagellum,” *Physics of Fluids*, vol. 22, no. 3, pp. 1–15, 2010.
- [162] A. Decoene, A. Lorz, S. Martin, B. Maury, and M. Tang, “Simulation of self-propelled chemotactic bacteria in a stokes flow,” *ESAIM: Proceedings*, vol. 30, no. 1, pp. 104–123, 2010.
- [163] L. J. Fauci and C. S. Peskin, “A computational model of aquatic animal locomotion,” *Journal of Computational Physics*, vol. 77, no. 1, pp. 85–108, 1988.
- [164] L. J. Fauci, “A Computational Model of the Fluid Dynamics of Undulatory and Flagellar Swimming A Computational Model of the Fluid Dynamics of Undulatory and Flagellar Swimming1,” *Source: American Zoologist Amer. Zool*, vol. 36, no. 36, pp. 599–607, 1996. [Online]. Available: <http://www.jstor.org/stable/3883999>{%}5Cn<http://www.jstor.org/stable/3883999?seq=1&cid=pdf-reference#references{-}tab{-}contents{%}5Cnhttp://about.jstor.org/terms>
- [165] P. T. Underhill and M. D. Graham, “Correlations and fluctuations of stress and velocity in suspensions of swimming microorganisms,” *Physics of Fluids*, vol. 23, no. 12, pp. 1–15, 2011.
- [166] F. Xu, R. Bierman, F. Healy, and H. Nguyen, “A multi-scale model of Escherichia coli chemotaxis from intracellular signaling pathway to motility and nutrient uptake in nutrient gradient and isotropic fluid environments,” *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 71, no. 11, pp. 2466–2478, 2016.
- [167] E. Lushi, H. Wioland, and R. E. Goldstein, “Fluid flows created by swimming bacteria drive self-organization in confined suspensions,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 111, no. 27, pp. 9733–9738, 2014. [Online]. Available: <http://www.pnas.org/lookup/doi/10.1073/pnas.1405698111>
- [168] A. P. Berke, L. Turner, H. C. Berg, and E. Lauga, “Hydrodynamic attraction of swimming microorganisms by surfaces,” *Physical Review Letters*, vol. 101, no. 3, pp. 1–5, 2008.

- [169] K. Son, D. R. Brumley, and R. Stocker, “Live from under the lens: Exploring microbial motility with dynamic imaging and microfluidics,” *Nature Reviews Microbiology*, vol. 13, no. 12, pp. 761–775, 2015. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/nrmicro3567>
- [170] M. A. Rivero, R. T. Tranquillo, H. M. Buettner, and D. A. Lauffenburger, “Transport models for chemotactic cell populations based on individual cell behavior,” *Chemical Engineering Science*, vol. 44, no. 12, pp. 2881–2897, 1989.
- [171] H. Jashnsaz, T. Nguyen, H. I. Petrache, and S. Pressé, “Inferring models of bacterial dynamics toward point sources,” *PLoS ONE*, vol. 10, no. 10, pp. 1–18, 2015.
- [172] M. R. Nejad and A. Najafi, “Chemotaxis mediated interactions can stabilize the hydrodynamic instabilities in active suspensions,” *Soft Matter*, vol. 15, no. 15, pp. 3248–3255, 2019.
- [173] N. Desai, V. A. Shaik, and A. M. Ardekani, “Hydrodynamic Interaction Enhances Colonization of Sinking Nutrient Sources by Motile Microorganisms,” *Frontiers in Microbiology*, vol. 10, no. March, pp. 1–14, 2019.
- [174] C. Pozrikidis, *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow*. Reading, Massachusetts: Cambridge University Press, 1992.
- [175] M. Lisicki, “Four approaches to hydrodynamic Green’s functions – the Oseen tensors,” pp. 1–5, 2013. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1312.6231>
- [176] L. Af Klinteberg and A. K. Tornberg, “Fast Ewald summation for Stokesian particle suspensions,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 76, no. 10, pp. 669–698, 2014.
- [177] C. Beenakker, W. Van Saarloos, and P. Mazur, “Many-sphere hydrodynamic interactions. 3. The influence of a plane wall.” *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, vol. 127, pp. 451–472, 1984.
- [178] C. G. Stoltz, “SIMULATION OF DILUTE POLYMER AND POLYELECTROLYTE SOLUTIONS : by Doctor of Philosophy (Chemical and Biological Engineering),” Ph.D. dissertation, 2006.
- [179] C. W. J. Beenakker, “Ewald sum of the Rotne–Prager tensor,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 85, no. 3, pp. 1581–1582, 1986. [Online]. Available: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.451199>

- [180] L. Alf Klinteberg, D. S. Shamsirgar, and A.-K. Tornberg, *Fast Ewald summation for free-space Stokes potentials*. Springer International Publishing, 2016, vol. 0123456789. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1607.04808>
- [181] H. Hasimoto, “On the periodic fundamental solutions of the Stokes equations and their application to viscous,” *J. Fluid Mech.*, no. 1958, pp. 317–328, 1958.
- [182] D. Saintillan, E. Darve, and E. S. Shaqfeh, “A smooth particle-mesh Ewald algorithm for Stokes suspension simulations: The sedimentation of fibres,” *Physics of Fluids*, vol. 17, no. 3, pp. 1–21, 2005.
- [183] M. Wang and J. F. Brady, “Spectral Ewald Acceleration of Stokesian Dynamics for polydisperse suspensions,” *Journal of Computational Physics*, vol. 306, pp. 443–477, 2016. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2015.11.042>
- [184] R. Cortez, L. Fauci, and A. Medovikov, “The method of regularized Stokeslets in three dimensions: Analysis, validation, and application to helical swimming,” *Physics of Fluids*, vol. 17, no. 3, pp. 1–15, 2005.
- [185] J. P. Hernández-Ortiz and J. J. De Pablo, “Self-consistent description of electrokinetic phenomena in particle-based simulations,” *Journal of Chemical Physics*, vol. 143, no. 1, 2015.
- [186] N. Darnton, L. Turner, K. Breuer, and H. C. Berg, “Moving Fluid with Bacterial Carpets,” *Biophysical Journal*, vol. 86, no. 3, pp. 1863–1870, 2004.
- [187] G. L. Miño, J. Dunstan, A. Rousselet, E. Clément, and R. Soto, “Induced diffusion of tracers in a bacterial suspension: Theory and experiments,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 729, no. 25, pp. 423–444, 2013.
- [188] B. Bonilla-Capilla, A. Ramírez-Saito, M. A. Ojeda-López, and J. L. Arauz-Lara, “Hydrodynamic interactions between colloidal particles in a planar pore,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 24, no. 46, 2012.
- [189] J. R. Blake, “A note on the image system for a stokeslet in a no-slip boundary,” *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 70, no. 2, pp. 303–310, 1971.
- [190] E. Wajnryb, K. A. Mizerski, P. J. Zuk, and P. Szymczak, “Generalization of the Rotne-Prager-Yamakawa mobility and shear disturbance tensors,” no. Shaqfeh 2005, 2013. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1307.7312><http://dx.doi.org/10.1017/jfm.2013.402>

- [191] R. Cortez and D. Varela, “A general system of images for regularized Stokeslets and other elements near a plane wall,” *Journal of Computational Physics*, vol. 285, pp. 41–54, 2015. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2015.01.019>
- [192] R. Cortez, “The Method of Regularized Stokeslets,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 23, no. 4, pp. 1204–1225, 2003.
- [193] R. A. O. H. B. Bird, C Curtiss, *Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 2: Kinetic Theory, 2nd Edition*. New York: Willey, 1987.
- [194] M. P. Allen and G. Germano, “Expressions for forces and torques in molecular simulations using rigid bodies,” *Molecular Physics*, vol. 104, no. 20-21, pp. 3225–3235, 2006.
- [195] B. S. D. Frenkel, *Understanding Molecular Simulation*. Orlando, FL, USA: Academic Press, 2001.
- [196] D. A. Brown and H. C. Berg, “Temporal Stimulation of Chemotaxis in *Escherichia coli*,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 71, no. 4, pp. 1388–1392, 1974. [Online]. Available: <http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.71.4.1388>
- [197] L. Medda, M. Monduzzi, and A. Salis, “The molecular motion of bovine serum albumin under physiological conditions is ion specific,” *Chemical Communications*, vol. 51, no. 30, pp. 6663–6666, 2015.
- [198] K. Younge, C. Christenson, A. Bohara, J. Crnkovic, and P. Saulnier, “A model system for examining the radial distribution function,” *American Journal of Physics*, vol. 72, no. 9, pp. 1247–1250, 2004. [Online]. Available: <http://aapt.scitation.org/doi/10.1119/1.1758228>
- [199] S. D. Danilov and D. Gurarie, “Quasi-two-dimensional turbulence,” *Physics-Uspekhi*, vol. 43, no. 9, pp. 863–900, 2000. [Online]. Available: <http://stacks.iop.org/1063-7869/43/i=9/a=R01?key=crossref.e0f7e786168300d23b48e8e17b99a4f6>
- [200] A. Creppy, O. Praud, X. Druart, P. L. Kohnke, and F. Plouraboué, “Turbulence of swarming sperm,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 92, no. 3, pp. 032722–11, 2015.
- [201] D. Nishiguchi and M. Sano, “Mesoscopic turbulence and local order in Janus particles self-propelling under an ac electric field,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 92, no. 5, pp. 1–12, 2015.

-
- [202] D. F. Hinz, A. Panchenko, T.-Y. Kim, and E. Fried, “Particle-based simulations of self-motile suspensions,” *Computer Physics Communications*, vol. 196, no. 10, pp. 45–57, 2015. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1310.0998><http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2015.05.014>
- [203] H. Stark, “Artificial Chemotaxis of Self-Phoretic Active Colloids: Collective Behavior,” *Accounts of Chemical Research*, vol. 51, no. 11, pp. 2681–2688, 2018.
- [204] E. Lushi, R. E. Goldstein, and M. J. Shelley, “Nonlinear concentration patterns and bands in autochemotactic suspensions,” *Physical Review E*, vol. 98, no. 5, 2018.
- [205] A. Sierou and J. Brady, “Accelerated Stokesian Dynamics simulations,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 448, pp. 115–146, 2008.