



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
UNIDAD IZTAPALAPA
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

*Aplicación de la ecuación de Boltzmann
al movimiento de bacterias con flagelos.*

Tesis para obtener el grado de
Maestría en Ciencias (Física).

Presenta

Fís. Rosa María Milián Morales.

Asesores

Dra. Rosa María Velasco Belmont.

Dr. Leonardo Dagdug Lima.

México, D. F., 30 de junio de 2010.

R e s u m e n

Durante las últimas décadas, la evolución al estado de equilibrio termodinámico de sistemas formados de automóviles, granos (partículas macroscópicas) y bacterias, se ha realizado a través de ecuaciones cinéticas que tienen la estructura de la ecuación de Boltzmann para gases diluidos.

En el presente trabajo se utiliza una ecuación tipo Boltzmann SPPBE [1] para estudiar el comportamiento de bacterias peritrías. Ésta considera que cada bacteria se mueve en línea recta hasta que experimenta autodifusión o colisión con alguna otra, evento que tiende a alinear las velocidades de las dos partículas, y que produce que a nivel macroscópico todas las bacterias se muevan en cierta dirección. A partir de la ecuación SPPBE encontramos las ecuaciones de transporte para las variables macroscópicas. Utilizando del método de máxima entropía se determina la función de distribución que representa el estado de equilibrio local del sistema. Por medio del método perturbativo de Chapman-Enskog truncado a primer orden se encuentra la función de distribución fuera del equilibrio local y una ecuación tipo Navier-Stokes.

Agradecimientos

Agradezco muy sinceramente, a mis asesores, la Dra. Rosa María Velasco Belmont y el Dr. Leonardo Dagdug Lima, por sus enseñanzas, paciencia y valiosos consejos que permitieron alcanzar los objetivos de esta tesis.

Agradezco a los profesores: Dra. Bertha González Pedrajo y Dr. Michel Picquart, por sus cuidadosas revisiones y las valiosas observaciones que contribuyeron al mejoramiento de este trabajo.

Al CONACyT, por el apoyo económico para realizar mis estudios de maestría.

A mis amigos del área de Mecánica Estadística y del posgrado de Física, agradezco todo el apoyo y la ayuda que me brindaron.

A Rubén Correa Quintos por ser parte de mi vida.

Agradezco a mi familia porque sin ellos y sus enseñanzas no estaría aquí, ni sería quien soy ahora.

Dedico esta tesis a mis Padres, a quienes agradezco de corazón por su amor, comprensión y apoyo sin condición ni medida.

Índice general

Resumen	I
1. Introducción	1
1.1. Ideas Generales	1
1.2. Antecedentes	3
2. Aspectos biológicos.	5
2.1. Movimiento colectivo de organismos vivos.	5
2.2. Bacteria y sus características	6
2.3. Movimiento de bacterias peritricas.	15
2.3.1. Características de la <i>Escherichia coli</i>	16
2.4. Comportamiento de cuerpos microscópicos en medios acuosos.	18
3. Modelos del movimiento colectivo.	23
3.1. Modelo de materia condensada	23
3.2. Modelo hidrodinámico	24
4. Modelo Cinético	27
4.1. Elementos básicos de Teoría Cinética de gases.	27
4.1.1. Definiciones	28
4.1.2. Ecuación de Boltzmann.	31
4.2. Ecuación de Boltzmann para partículas auto-propulsadas (SPPBE)	36
5. Solución de la ecuación SPPBE.	41
5.1. En términos de la densidad local	41
5.2. En función de la densidad uniforme.	44
6. Ecuaciones hidrodinámicas.	45

6.1. Gases simples	45
6.2. Bacterias	47
6.2.1. Ecuación de Continuidad.	47
6.2.2. Ecuación de Balance del momento lineal.	50
7. Ecuaciones de movimiento para bacterias.	53
7.1. Método de Máxima Entropía.	53
7.2. Método de Chapman-Enskog	60
8. Discusiones	77
8.1. Conclusiones	79
8.2. Perspectivas	80
9. Apéndices	81
9.1. Cuadros de constantes	81
9.2. Cálculo de la divergencia de un tensor.	82

1

Introducción

1.1. Ideas Generales

La dinámica, o estudio del movimiento de la materia, se puede dividir en dos partes: dinámica de cuerpos rígidos y dinámica de cuerpos flexibles. Esta última comprende: elasticidad (sólidos elásticos) y mecánica de fluidos. Un fluido es una sustancia incapaz de resistir fuerzas o esfuerzos de corte sin desplazarse, mientras que un sólido si puede hacerlo. Los fluidos se clasifican generalmente en líquidos y gases. Un líquido está sometido a fuerzas intermoleculares que lo mantienen unido de tal manera que su volumen es definido pero su forma no; son ligeramente compresibles y su densidad varía poco con la temperatura o presión. Un gas, por otra parte, consta de partículas en movimiento que chocan unas con otras y tratan de dispersarse de tal modo que un gas no tiene forma ni volumen definidos y llenará cualquier recipiente en el cual se coloque; para una masa dada, la presión, la temperatura, y el volumen que ocupa, se relacionan por medio de la ley de los gases, o sea, la ecuación apropiada del estado del gas [2].

En la mecánica de un cuerpo rígido, nos preguntamos generalmente: ¿cuál es la posición de la partícula en el espacio en función del tiempo? De esta información se pueden deducir otras, como la velocidad y la aceleración. Sin embargo, en un fluido no se trata con una sola partícula, pues se quieren describir 10^{23} partículas/mol y no es practicable hacerlo de manera individual, sino que se considera un continuo. Ahora la pregunta es ¿cuáles son la velocidad, la aceleración y las propiedades termodinámicas en algún punto del espacio (relativo a un sistema fijo de coordenadas) como una función del tiempo? A medida que el tiempo transcurre, el fluido en ese punto del espacio está siendo reemplazado constantemente por uno nuevo debido al paso del flujo, de tal manera que no interesa seguir el rastro de cada partícula del fluido sino la historia en algún punto del espacio sin mirar cuál de las partículas del fluido se encuentran allí en un momento determinado. Esta descripción del fluido se llama euleriana, en oposición a la descripción lagrangiana que se usa para seguir la trayectoria de una partícula como en la dinámica de cuerpos rígidos. El continuo en un

fluido significa que la distancia entre las partículas fluidas (o moléculas), o más exactamente la trayectoria libre media, es muy pequeña comparada con cualesquiera de las dimensiones físicas del problema estudiado [2]. Dicho de otra manera, es válido tratar a los fluidos como continuos siempre que el volumen del fluido en estudio contenga un número suficiente de moléculas para que tenga sentido hacer promedios estadísticos. Se considera que las partículas macroscópicas de un continuo varían de uno a otro punto del fluido [3].

Son cinco las variables básicas en mecánica de fluidos: tres componentes de la velocidad y dos propiedades termodinámicas que pueden escogerse entre presión, temperatura, densidad, entalpía, entropía, etc., porque dos propiedades termodinámicas son suficientes para determinar el estado del fluido y todas las propiedades. El campo de flujo de un fluido queda completamente determinado una vez que el vector velocidad y dos propiedades termodinámicas se establezcan como función del espacio y el tiempo. Esto quiere decir que se necesitan cinco ecuaciones independientes: las tres ecuaciones de la ecuación de movimiento, una ecuación de continuidad y una ecuación de energía [2].

Entonces para describir el movimiento de los fluidos, se pueden establecer modelos matemáticos en diferentes escalas de observación y representación. La escala microscópica describe el estado físico (posición, velocidad y aceleración) de cada objeto individual, partículas (átomos o moléculas), que resulta poco practicable debido al número tan grande de moléculas en un fluido (10^{23} partículas/mol). En cambio desde el punto de vista hidrodinámico (fenomenológico o macroscópico) el fluido se considera como un medio continuo, en el que se estudia un elemento de fluido en el campo de flujo, las fuerzas que actúan sobre él para calcular las velocidades resultantes y los cambios del elemento como función del espacio y el tiempo. Frecuentemente solo cantidades macroscópicas son de interés práctico, así que es conveniente usar ecuaciones que las incluyan directamente [2].

El enfoque intermedio surge en 1872, cuando el físico austriaco *Ludwing Boltzmann* quiere obtener la segunda Ley de la termodinámica a partir de modelos atómicos, en su trabajo titulado "Más estudios sobre el equilibrio térmico entre las moléculas de un gas" concluye que para describir la evolución al estado de equilibrio termodinámico se tiene que considerar que "*Las propiedades térmicas de gases y otras sustancias obedecen leyes perfectamente definidas, a pesar del hecho de que están compuestos por un gran número de moléculas que efectúan un movimiento rápido e irregular*" ; y que la explicación de estas propiedades deberá basarse en la teoría de probabilidad, para lo que es necesario conocer la función de distribución que determina el número de moléculas en cada estado para todo tiempo, idea fundamental de lo que se conoce como la teoría cinética [4]. La teoría cinética de la materia relaciona el mundo microscópico con el mundo macroscópico, pues explica los fenómenos macroscópicos y las propiedades accesibles a nuestros sentidos (presión, temperatura, densidad) a partir de las leyes (fuerzas: interacciones) que gobiernan las partículas microscópicas. En los últimos años, esta teoría se ha utilizado para describir sistemas como: colonias de bacterias [1],[5],[6]; flujo vehicular [8],[9],[10]; flujo granular [11],[12],[13]; gases relativistas [14]; plasmas [15] e incluso sistemas económicos [16]. En todas estas aplicaciones se han definido ecuaciones que tienen la estructura de la ecuación de Boltzmann para gases simples.

1.2. Antecedentes

Todos los organismos, al igual que el resto de la materia que nos rodea y, por supuesto, nosotros mismos, estamos constituidos por átomos organizados en moléculas y éstas en estructuras en permanente cambio.

La extensión de la aplicación de la física a la materia viva, se ha llevado a cabo considerando la principal diferencia entre materia inerte y viva: los organismos presentan organización de increíble complejidad, que es controlada por sutiles balances de energía, que se manifiestan en el reconocimiento intermolecular [4].

La materia con vida posee dos características importantes: complejidad y organización. Cualquier organismo, por simple que parezca, por ejemplo una bacteria, interactúa con el medio activamente: se alimenta, busca el ambiente apropiado, se desplaza, ataca a sus enemigos, intercambia energía y materia constantemente. Actividades que son controladas por el código genético, y que además permiten al organismo perpetuarse a través de sus descendientes.

El conocimiento conseguido gracias al estudio de la estructura de las células bacterianas y de las funciones de estas estructuras tiene una considerable aplicación en los procesos vitales de todas las células. Existe una apreciable unidad o similitud de los principales fenómenos biológicos entre todos los organismos, desde los microbios a los seres humanos. Debido a la facilidad de experimentar y manipular con bacterias, se han convertido en el modelo experimental favorito para investigar el mecanismo de los procesos biológicos que ocurren en los seres humanos. Los resultados obtenidos de las investigaciones con bacterias pueden ayudar a establecer un patrón de los detalles de los procesos en las formas superiores de vida.

Las bacterias al nadar cambian aleatoriamente de dirección en pocos segundos; sin embargo, si se encuentran frente a un gradiente de concentración, la frecuencia del cambio de dirección puede ser alterada para que la trayectoria se dé en un sentido favorable a la vida de la bacteria. La modulación de la rotación flagelar constituye la base de la quimiotaxis [18].

La *E. coli* (*Escherichia coli*) es una bacteria que vive en nuestro intestino y es uno de los seres vivos más simples y mejor entendidos, aunque muy sofisticados [22].

La dinámica del movimiento bacterial, se ha llevado a cabo considerando distintos enfoques, en la descripción hidrodinámica (fenomenológica) [7] los coeficientes de transporte no contienen información de las características individuales de las bacterias; desde el punto de vista de la materia condensada, las colonias de bacterias exhiben distintas "fases" en equilibrio (por ejemplo, cristales líquido) que pueden ser clasificadas por sus simetrías [6].

La era moderna del estudio del movimiento colectivo de individuos en sistemas biológicos comienza con el trabajo de Vicsek y colaboradores [5], en él reconocen que los flocks se encuentran en una amplia categoría de sistemas dinámicos fuera del equilibrio con muchos grados de libertad. En particular, hacen una analogía entre los flocks y el ferromagnetismo: el vector velocidad de cada partícula es como el spin magnético o un átomo de hierro en un ferromagneto. La "fase móvil" usual de los flocks, en que las partículas en promedio, se mueven en la misma dirección, es entonces una analogía a la fase ferromagnética del hierro, en que todos los espines se orientan en la misma dirección. Su modelo supone que cada individuo tiende a adoptar la dirección de movimiento de sus vecinos, perturbados por un cierto ruido intrínseco que afecta sus interacciones. Se observa una transición

de fase que transcurre entre un estado de movimiento colectivo ordenado (bandadas, cardúmenes, manadas, etc.) y otro desordenado, cuando se ajusta el parámetro de control (ruido que afecta las interacciones).

La teoría cinética puede aplicarse para modelar sistemas formados de organismos vivos. Algunos libros, entre otros editados por Bellomo y Pulvirenti (2000), Degond, Pareschi, y Russo (2003), Cercignani y Gabetta (2007), dan una explicación del estudio relacionado a la aplicación de los métodos de la teoría cinética en el caso de sistemas complejos [30].

2

Aspectos biológicos.

2.1. Movimiento colectivo de organismos vivos.

El movimiento colectivo de organismos vivos (*self-propelled particles*), como su nombre lo indica, tiene la característica principal de que en cierto instante los organismos se mueven en una dirección, como resultado de su interacción. Este comportamiento nos es familiar porque lo observamos en nuestro ambiente natural, en multitudes humanas [32], grupos de animales (pájaros, peces, insectos) [33], motores moleculares [34] y colonias de bacterias [35]. También abarca un rango de escalas enorme: desde kilómetros (rebaños o manadas) hasta micrómetros (microorganismos). Cada uno de los movimientos depende de las características y propiedades de los organismos, así como del mecanismo de auto-propulsión [1].

Describir el comportamiento colectivo de células se ha convertido en un tema importante y de interés para investigadores de varios campos; de esta manera, los físicos buscan precisar su movimiento y los tipos de mediciones que se hacen en su medio ambiente; los bioquímicos están interesados en la estructura e interacciones de moléculas que monitorean el ambiente externo, información que pasa de fuera hacia dentro de la célula, datos de procesos sensoriales y efectos de respuesta; los genetistas identifican los genes que especifican estas moléculas y aprenden como dichos genes se turnan para intervenir. Los científicos se preguntan si existe alguna característica global o universal de este tipo de comportamiento, que se presenta cuando muchos organismos se involucran y parámetros como la distancia media entre los organismos se modifica [23].

La "fase móvil", en la que en promedio las partículas se mueven en la misma dirección, es el resultado de que los organismos individuales obtienen algún indicio direccional a partir de su medio ambiente, el sol, el viento, el océano, corrientes de aire, gradientes de temperatura, el campo magnético de la Tierra, existen una gran variedad de estos indicadores que funcionan como orientadores [55]. También puede explicarse en términos de supervivencia, como respuesta de protección de los organismos en contra de sus depredadores. La langosta del desierto en su etapa juvenil (en la que

no vuela), tiene este comportamiento, pues al aumentar su densidad, marchan colectivamente por temor a ser devoradas por las que se encuentran detrás (canibalismo). Otros organismos se mueven "ordenadamente" porque resultan beneficiados, aerodinámicamente los costos de vuelo de los miembros de un grupo son menores comparados con los costos asociados a un organismo solitario. Un ejemplo es el caso de estorninos que forman estructuras tridimensionales caprichosas en las tardes de invierno sobre la ciudad de Roma. Esta sincronía la logran por la habilidad para procesar la información de sus sentidos, como resultado de cierto equilibrio entre repulsión y cohesión. Cada individuo debe cambiar continuamente de velocidad y mantenerse alineado tomando como referencia la dirección de movimiento de sus vecinos, se trata de un balance entre la habilidad de influir y ser influido. Investigadores han demostrado que conforme aumenta la densidad del grupo los cambios de dirección son cada vez menos [55].

De las observaciones, se ha concluido que el movimiento colectivo de organismos no es causado por un integrante líder global, en lugar de eso, este comportamiento es causado por los miembros individuales que siguen el movimiento de sus vecinos. Por lo que es crucial describir correctamente la interacción entre los miembros del grupo de organismos, para poder entender y modelar su comportamiento colectivo [36].

Las colonias de bacterias son uno de los sistemas que se forman de muchas células que interactúan y exhiben un comportamiento macroscópico no trivial. Su habilidad de migración depende de la densidad de células en el grupo, ya que una célula aislada no puede moverse fácilmente, un grupo de ellas si puede hacerlo. Se ha demostrado que el mecanismo por el que las bacterias se desplazan involucra quimiotaxis repulsiva o atractiva [63].

La importancia del estudio de los mecanismos del movimiento colectivo es el control y manejo de plagas de insectos, disminución de efectos perjudiciales en el hombre, con relación a la calidad de vida y la economía de ciertos países. Además puede servir para el desarrollo de nuevas tecnologías, desde enjambres de robots para la exploración de lugares complejos y de ambientes variables, hasta el desarrollo de modelos para predecir las tendencias económicas en la bolsa de valores.

2.2. Bacteria y sus características

Las células microbianas son diferentes de las células de animales y plantas que son incapaces de vivir aisladas en la naturaleza, en vista de que únicamente pueden sobrevivir como parte de organismos multicelulares. Una célula microbiana individual generalmente es capaz de llevar a cabo sus propios procesos vitales de crecimiento, generación de energía y reproducción, independientemente de otras células, ya sean del mismo tipo o de otro totalmente diferente [19].

Los microorganismos como células.

La teoría de que la célula es la unidad fundamental de toda materia viva es una de las ideas unificadoras más importantes de la biología. Una célula sola es una entidad, aislada de otras células por un pared o membrana, celular, que contiene en su interior diversas estructuras subcelulares, algunas de las cuales se encuentran en todas las células y otras aparecen sólo en algunas. Todas las

células presentan ciertas características químicas en común, por ejemplo, tienen proteínas, ácidos nucleicos, lípidos y polisacáridos. Cada tipo de célula tiene una estructura y tamaño definidos, que no debe considerarse un cuerpo inalterable, ya que es una unidad dinámica que constantemente sufre cambios y sustituye sus partes. Incluso si no está creciendo, toma continuamente materiales de su medio y los transforma en sustancia propia. Al mismo tiempo arroja constantemente a su medio materiales celulares y productos de desecho. Una célula es por tanto, un sistema abierto siempre cambiante pero que permanece siempre el mismo [21].

Aunque todas las células tienen muchas cosas en común, en realidad existen dos tipos de arquitectura celular, que difieren uno de otro en muchos aspectos fundamentales. Esos dos tipos de células se llaman procariotas y eucariotas, ver figura 2.1. Las bacterias y las cianofíceas, también llamadas algas azules, son procariotas, mientras que todas las demás algas, hongos y los protozoos son eucariotas. La diferencia más importante entre estas células reside en la estructura del núcleo. La célula eucariota tiene un núcleo rodeado por una membrana dentro de la cual están los cromosomas que contienen el material hereditario. La procariota, por el contrario, no tiene núcleo ni cromosomas, y su material genético está contenido en una sola molécula desnuda de ADN [21]. La longitud de esta molécula, es varios cientos de veces más grande que la célula misma y contiene toda la información hereditaria necesaria para asegurar la supervivencia de la pequeña célula [20].

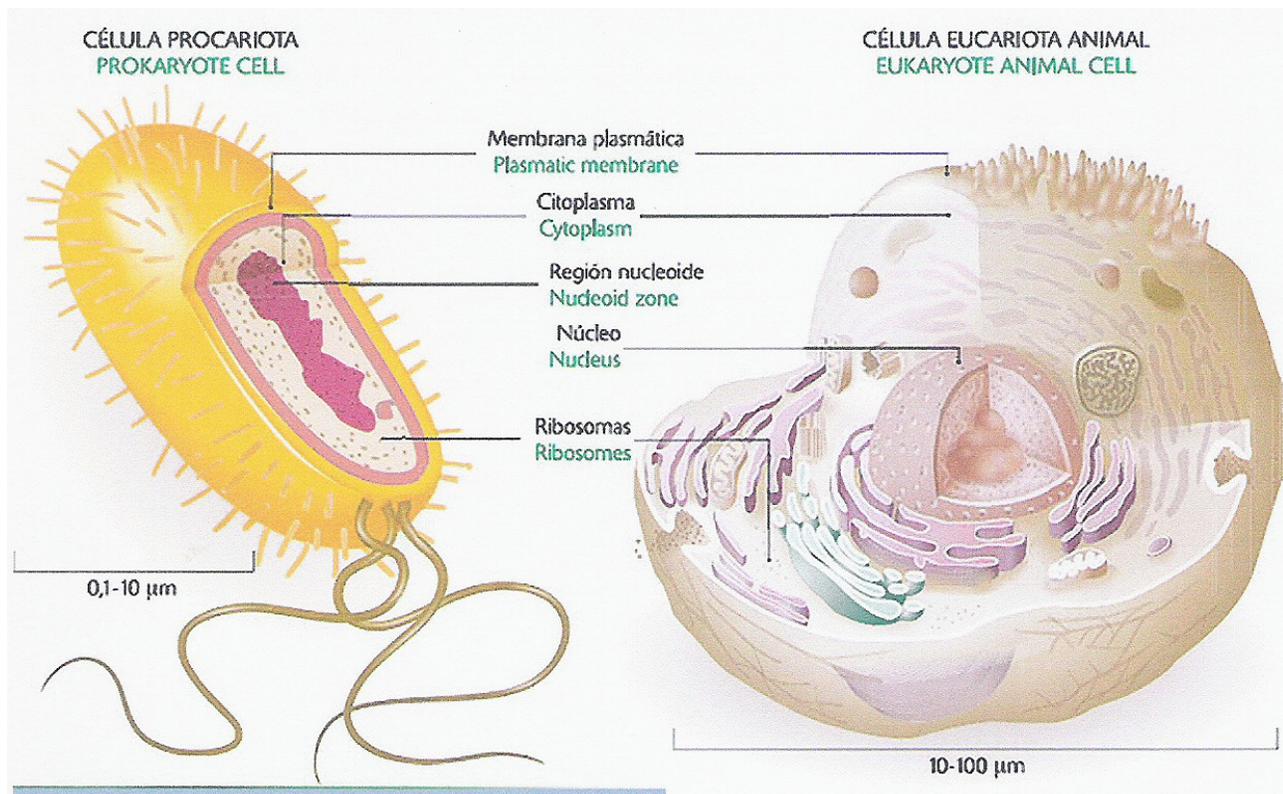


Figura 2.1: Comparación de la estructura de la célula procariota y eucariota.

Observación de lo muy pequeño.

El conocimiento de la morfología y estructura de las bacterias comenzó con las observaciones de Antony van Leeuwenhoek (1664), estudiante holandés de historia natural, que utilizando microscopios fabricados por él mismo, dibuja lo que llamó "minúsculos animalículos" en los que se pueden identificar diferentes tipos de bacterias comunes. Después, las mejoras del microscopio óptico y de las técnicas de tinción, permitieron observar con más precisión la forma característica de estas células, tamaño, estructuras externas y sus modelos de ordenamiento. Al inicio de la década 1940 se pudo disponer del microscopio electrónico (fácil observación de objetos de $0.001\mu\text{m}$), su alto poder de resolución junto con nuevos métodos para preparar las muestras hicieron posible identificar las partes estructurales de la célula individual. También se fueron desarrollando técnicas para desintegrar células bacterianas, aislar los componentes celulares y analizar su composición química [19].

Los componentes celulares pueden dividirse en dos grupos, invariables, esto es, que se encuentran en todas las células procariotas y probablemente son esenciales para la vida, y los variables, que se encuentran en algunas pero no en todas las células y probablemente participan en funciones más especializadas. En las estructuras invariables de la célula se incluyen la membrana celular, los ribosomas y la región nuclear. Las estructuras variables de la célula son la pared celular, flagelos, pelo, cápsulas, capas de limo, cuerpos de inclusión, vacuolas gasíferas y esporas. Bajo las condiciones apropiadas, todas estas estructuras pueden visualizarse en micrografías electrónicas para analizar su distribución y disposición en las células [19].

Tamaño de células procarióticas.

Aunque la mayoría de las células procariotas son pequeñas, existe una gran variedad de tamaños entre los diferentes organismos, algunos ejemplos se encuentran en el cuadro 2.1

Organismo	tamaño (μm)
<i>Bacillus megaterium</i>	1.35×3
<i>Escherichia coli</i>	0.5×2
<i>Diplococcus pneumoniae</i>	0.875 de diámetro
<i>Hemophilus influenzae</i>	0.25×1.25

Cuadro 2.1: Tamaño de células procarióticas. [21]

Forma y disposición de las bacterias.

Las tres principales formas de las bacterias son esferas, bastones y espirales, ver la Figura 2.2. Se conoce a la bacteria esférica como coco (plural cocos). Los cocos no son esferas perfectas; por lo regular son algo aplanados, a semejanza de un balón de fútbol americano y pasan por una etapa esférica durante su crecimiento. Aparecen en forma independiente o aislada o en pares (*diplococos*), cadenas (*estreptococos*), cúmulos irregulares, en forma de racimos de uvas (*estafilococos*) o en agrupamientos cúbicos a manera de rectángulos (*sarcinas*).

Las bacterias en forma de bastón son rectas y cilíndricas o bien elipsoidales largas; a veces su aspecto

es algo curvo u ondulado. Aparece solas, en cadenas o en disposición paralela.

Los organismos de forma helicoidal o espirilos tienen la forma de un sacacorchos. Generalmente aparecen como células aisladas o en cadenas cortas [17].

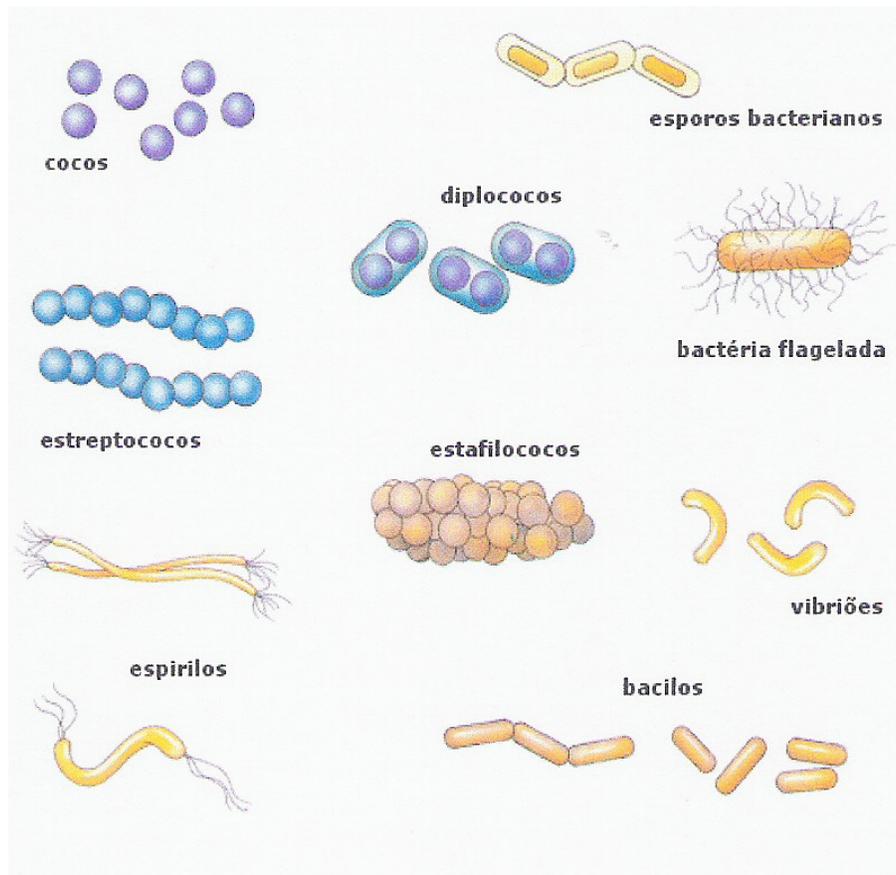


Figura 2.2: Forma y disposición bacteriana.

Estructura de célula procariótica.

Entre los componentes principales de una célula bacteriana se encuentra:

La membrana plasmática, delgada estructura que rodea completamente la célula. Esta estructura vital es la barrera crítica que separa el interior de la célula de su medio ambiente [19]. Con cuidadosas técnicas de microscopía electrónica de alta resolución, la membrana plasmática tiene el aspecto de dos líneas separadas por una zona clara.

La pared celular es una estructura fuerte y rígida que la protege, y sirve de sostén para las partes más débiles y bioquímicamente más activas de la célula. La pared celular procariótica es químicamente diferente de la de la célula eucariótica. El método de tinción diferencial (no tiñe igual a todas las células) más utilizado para localizar estructuras específicas en la célula o para distinguir entre diferentes tipos de células es la tinción Gram, el proceso consiste en la tinción de las bacterias con una solución de cristal violeta, quitar el exceso de colorante, para después decolorar con alcohol o acetona,

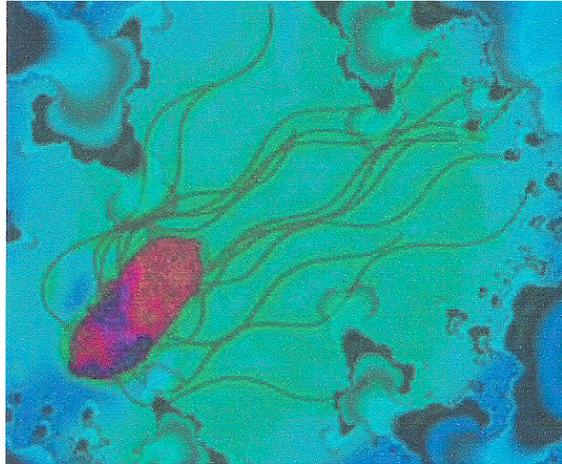


Figura 2.3: Bacteria peritrica.

algunos organismos no se decoloran, grampositivos, mientras que otros si lo hacen gramnegativos [21].

El ADN, que contiene la información genética de la célula, está presente como una cadena desnuda y no rodeada por una membrana. La longitud de esta molécula es muchas veces la longitud de la célula. Por ejemplo, la longitud de una célula de *Escherichia coli* es de $2\mu\text{m}$ mientras que la de su ADN es de cerca de $1200\mu\text{m}$. Esto quiere decir que el ADN está muy enrollado dentro de la célula. En ocasiones es posible visualizar una parte de la célula procariótica que se llama región nuclear o nucleoide donde se concentra el ADN.

El citoplasma contiene partículas de más o menos 20nm de diámetro, los ribosomas, que forman parte de la maquinaria sintetizadora de proteínas de las células. Los ribosomas de microorganismos procarióticos son ligeramente más pequeños y ligeros que de los eucarióticos.

La capacidad de las bacterias de moverse en forma dirigida, en respuesta a diversos estímulos ambientales, ya sea por señales físicas o químicas, le confiere al microorganismo beneficios potenciales entre los que se encuentran una mayor eficiencia en la adquisición de nutrientes, el evitar sustancias tóxicas, el establecer relaciones simbióticas, así como el poder alcanzar los sitios óptimos de colonización en el caso de bacterias patógenas. El movimiento puede ocurrir a partir de dos mecanismos: el nado o el deslizamiento; el último involucra el movimiento lento ($1\text{-}60\mu\text{m}/\text{min}$) sobre superficies sólidas, es característico de Myxobacterias [18, 57] y muchas cianofíceas [21]; sin embargo, el aparato responsable de este tipo de movilidad hasta ahora no ha sido bien caracterizado. Por otro lado, la movilidad bacteriana que se genera a través del nado, se debe a orgánulos especializados denominados flagelos (del latín, *flagellum* «látigo») [18].

Estructura flagelar.

El flagelo bacteriano es un largo filamento helicoidal o propela, que es impulsado por un motor rotatorio embebido en la superficie celular. La estructura básica del flagelo se puede dividir en tres fragmentos principales, distinguibles claramente con microscopio electrónico: filamento, gancho y cuerpo basal (ver figura 2.4), esta estructura varía muy poco en células procariotas [18].

El filamento es una estructura helicoidal de localización extracelular, que constituye el componente propulsor del flagelo y que genera el trabajo hidromecánico en el medio. Esta propela es una estructura rígida, que varía entre 5 y 15 μm de longitud, con 0.02 μm de diámetro; es un homopolímero constituido por miles de subunidades de la proteína denominada FliC o flagelina, que se organiza de tal manera que forma una hélice izquierda, lo que permite que la fuerza rotacional o torca se convierta en fuerza de traslación que genera un " empuje mecánico " [58, 60].

El gancho es una estructura flexible de acoplamiento y de localización extracelular, que conecta al filamento con el motor celular. La flexibilidad de dicho conector universal permite que se transmita la fuerza de rotación al filamento en un amplio intervalo de direcciones. El gancho es estructuralmente similar al filamento, siendo un homopolímero de entre 120 y 130 copias de la proteína FlgE. Esta estructura presenta un tamaño bien determinado, siendo en *S. typhimurium* de 55 ± 6 nm. A pesar de que el gancho y el filamento están estructuralmente relacionados, las propiedades mecánicas de ambos son diferentes, por lo que existen entre éstos, proteínas que funcionan como adaptadores de unión denominadas HAPs (del inglés hook associated proteins) o proteínas asociadas al gancho [18, 60].

El cuerpo basal es un complejo multiproteico embebido en la superficie celular, en el que se localiza el motor flagelar. Esta estructura consiste de un eje central y 4 complejos en forma de anillos. El anillo MS se encuentra localizado en la membrana citoplasmática y se ha propuesto que constituye parte del rotor del motor flagelar, donde se genera la torca. Los anillos externos P y L se encuentran en el mismo plano de la capa de peptidoglicano y de la membrana externa de lipopolisacáridos, respectivamente, formando un cilindro que genera un espacio que permite a la estructura del eje rotar libremente evitando fricción. El eje funciona como una flecha conductora que se une al rotor y que se encarga de transmitir la torca, generada por el motor, hacia las estructuras extracelulares: gancho y filamento. Por lo tanto, el anillo MS, el eje, el gancho y el filamento constituyen una sola unidad rotatoria, mientras el par de anillos L y P forman la parte estacionaria [18, 58].

Existen grandes diferencias entre el flagelo de organismos procariotas y eucariotas. El filamento bacteriano (20 nm de diámetro) se encuentra constituido por miles de subunidades de un solo tipo de proteína, mientras que el flagelo eucarioto (200 nm de diámetro) presenta una compleja arquitectura de 9+2 microtúbulos y está formado por más de 200 diferentes polipéptidos. Las principales diferencias entre éstos se refieren al mecanismo de movimiento y a la fuente de energía utilizada. A diferencia del flagelo eucarioto, que gracias al deslizamiento entre microtúbulos se mueve como látigo para impulsar al organismo, el flagelo bacteriano rota, por tanto no realiza un trabajo quimiomecánico *per se*, sino que es pasivamente dirigido por un motor de rotación bidireccional. La fuerza de rotación o torca, tanto en la dirección a favor como en contra de las manecillas del reloj, se genera en la base del flagelo y se transmite hacia las estructuras extracelulares [18, 59].

Crecimiento flagelar.

El flagelo individual no crece sobre la base como lo hace un pelo de un animal, sino por la punta. Las moléculas de flagelina que se forman en la célula aparentemente atraviesan el corazón hueco del flagelo y se agregan en el extremo terminal. La síntesis de un flagelo a partir de sus moléculas de flagelina se da por un proceso que recibe el nombre de autoensamblaje: toda la información sobre la estructura final del flagelo se encuentra en las mismas subunidades de proteínas. El crecimiento del flagelo se presenta más o menos continuamente hasta que se alcanza un máximo de longitud, pero si se rompe una porción de la punta, ésta se regenera [19].

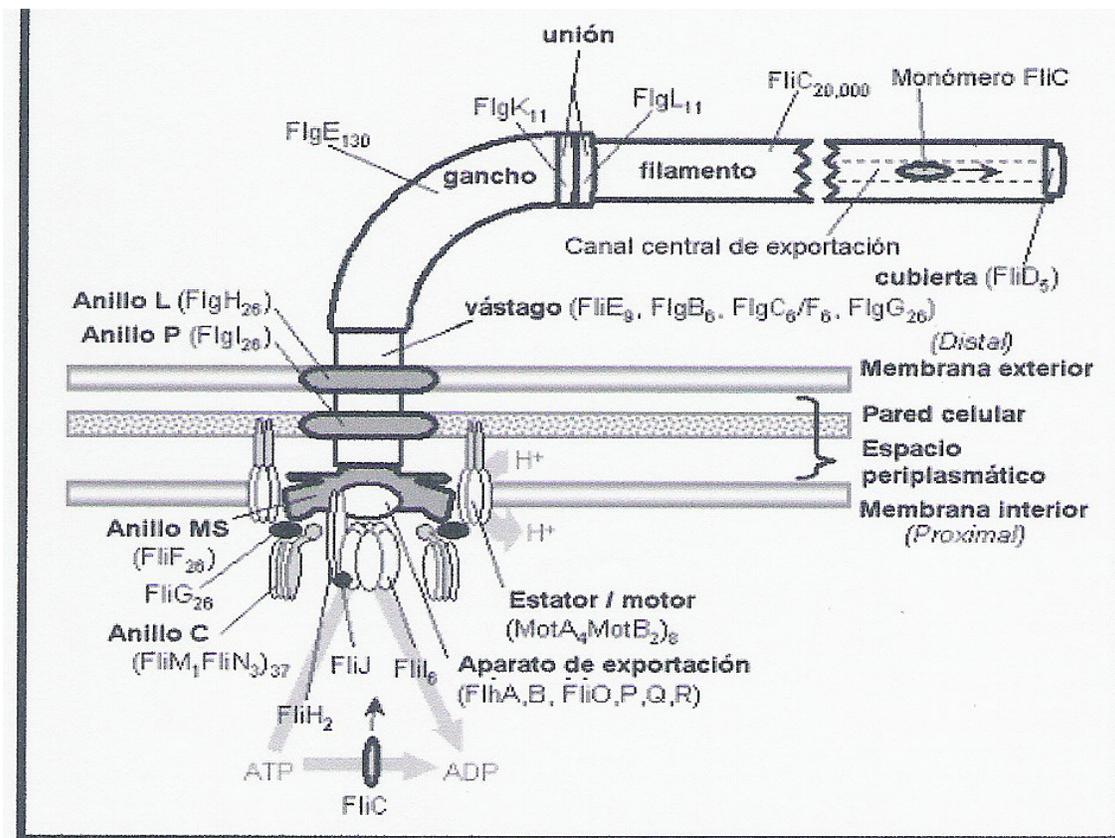


Figura 2.4: Partes del flagelo bacteriano.

Movimiento flagelar.

¿Cómo se le imparte movimiento al flagelo? Por mucho tiempo se pensó que el movimiento flagelar era en forma de ondas desde la base, de la misma manera en que se mueve un látigo, en la actualidad hay suficiente información para pensar que un flagelo es en realidad una estructura rígida que no se flexiona, sino que se mueve por rotación, igual que una hélice. Los fundamentos de esta conclusión se han obtenido observando el comportamiento de células que fueron ancladas o fijadas por sus flagelos a laminillas microscópicas. En estas preparaciones se vio que las células rotaban alrededor del punto de unión a velocidades de revolución consistentes con aquellas inferidas por los movimientos flagelares de células en libertad [19].

En la cuadro 2.2 se dan las velocidades medias de varias bacterias. Una velocidad de $50\mu\text{m}/\text{segundo}$ es equivalente a $0.18\text{m}/\text{hora}$, lo cual parece un movimiento lento. Sin embargo, es más razonable comparar velocidades en términos de números de longitudes celulares desplazadas por segundo. El animal más rápido, el guepardo, tiene aproximadamente 1.2m de longitud y corre a una velocidad máxima de $112\text{km}/\text{hora}$, o sea unas tres longitudes por segundo. De la tabla 2.2 se deduce que las velocidades bacterianas, que a menudo oscilan alrededor de 10 ó más longitudes por segundo, son mayores que la de los organismos superiores [21].

Organismo	Flagelación	Longitud (L) (μm)	Velocidad $\mu\text{m}/\text{seg}$	L/seg
<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	Polar	1.5	55.8	37
<i>Chromatium okenii</i>	Lofotrica	10	45.9	5
<i>Thiospirillum jenense</i>	Lofotrica	35	86.5	2
<i>Escherichia coli</i>	Peritrica	2	16.5	8
<i>Bacillus licheniformis</i>	Peritrica	3	21.4	7
<i>Sarcina ureae</i>	Peritrica	4	28.1	7

Cuadro 2.2: Velocidades de bacterias comunes [21].

Las bacterias con flagelos nadan de una manera que depende del tamaño y forma del cuerpo de la célula, así como del número y distribución de los flagelos. Los sistemas flagelares más estudiados son los de las bacterias Gram(-) *Escherichia coli* y *Salmonella typhimurium*, que presentan entre 5 y 10 flagelos por célula distribuidos alrededor de la célula [18]. Sin embargo, existen varios patrones flagelares y tanto el número como la localización de los flagelos, varía entre las diferentes especies.

La clasificación de las bacterias de acuerdo al número y localización de sus flagelos [38] se muestran en la figura 2.5

- **A** Las bacterias monotricas tienen un solo flagelo, normalmente la localización del flagelo (en bacterias bacilares) es polar o subpolar.
- **B** Bacterias con dos o más flagelos formando un penacho, normalmente en un polo, se llaman lofotricas, (*lofo* que quiere decir " penacho " y *tricos* significa " pelo ").
- **C** Con dos penachos de flagelos, uno en cada polo se llaman bacterias anfotricas.
- **D** Las bacterias peritricas tienen flagelos repartidos por toda la superficie,
- Bacterias presentan flagelos de inserción lateral, en penachos densos (*Selenomonas*), bien diseminados (*Pectinatus*).

Cuando se observan bacterias móviles con microscopio, es importante distinguir entre el movimiento vital y otro proceso distinto, el movimiento browniano, que posee incluso la materia no viva [21]. El movimiento browniano es una agitación al azar que tienen todas las pequeñas partículas y que se debe al movimiento molecular de las mismas moléculas de agua, el cual es transferido a las partículas. Una partícula con movimiento browniano se mueve de un lado a otro de un modo indeterminado, sin tomar ninguna dirección, ver figura 2.6. En cambio una bacteria móvil se desplaza a través del agua con un movimiento dirigido. Sólo las pequeñas partículas tienen movimiento browniano, por tanto las grandes bacterias, las levaduras y las células grandes sólo presentan este fenómeno ligeramente o no lo presentan en absoluto.

Taxis.

La mayoría de las bacterias móviles son capaces de cambiar sus movimientos en respuesta a estímulos ambientales, exhibiendo los llamados movimientos tácticos o taxis. Por ejemplo, las fotosintéticas

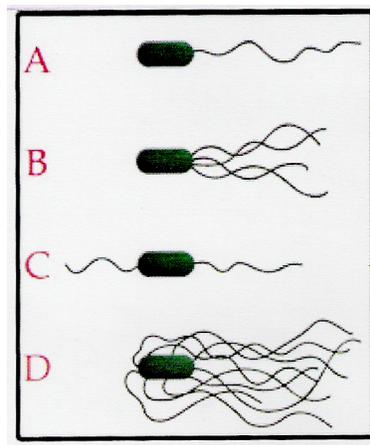


Figura 2.5: Distribución de flagelos en las bacterias.

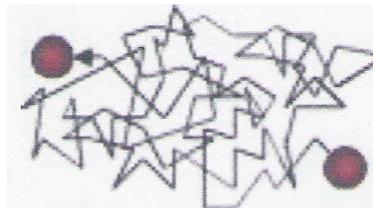


Figura 2.6: Movimiento browniano de una partícula.

se mueven en respuesta a la luz (fototaxis). Imaginemos una de estas bacterias moviéndose en un punto de luz. Mientras va desplazándose a través del líquido puede salir accidentalmente del campo iluminado, inmediatamente la célula se detiene y se vuelve en dirección contraria, entrando así de nuevo a la luz. Se mueve hacia atrás y hacia adelante a través del líquido oscuro y no muestra especial atracción a la luz. (Después de todo, no posee medios para saber que el punto de luz está allí). Pero si en el transcurso de sus movimientos penetra por azar el punto de luz, permanece en él y siempre que se salga invertirá su dirección. Por tanto, si bien las bacterias no nadan hacia la luz, la mayoría de las células acaban en el punto de luz y sólo pocas permanecen en la oscuridad, no responden a la cantidad absoluta, sino a las diferencias de intensidad lumínica. Muchas bacterias presentan también tactismos en respuesta a diferencias en las concentraciones de sustancias químicas, fenómeno que se denomina quimiotaxis [21].

El descubrimiento del fenómeno de quimiotaxis se remonta a finales del siglo XIX, cuando Engelmann y Pfeffer descubrieron la taxis a oxígeno, minerales y nutrientes orgánicos. A su vez, en 1966, Julius Adler demostró que las bacterias se mueven preferentemente en la dirección de una mayor concentración de fuentes energéticas como galactosa, glucosa, ácido aspártico, treonina y serina [18].

En la actualidad, se sabe que el movimiento bacteriano no es azaroso, sino que responde a diversos estímulos ambientales como luz, oxígeno, pH, temperatura, presión, osmolaridad y a la presencia de diferentes compuestos químicos. La respuesta a dichos estímulos le permite a la bacteria migrar a través de gradientes de concentración de sustancias químicas atrayentes o repelentes. Sin embargo, las

dimensiones de una bacteria son tan pequeñas, que no pueden sentir una diferencia de concentración a lo largo de su cuerpo celular, por lo que integran la información temporalmente, comparando los estímulos sensoriales pasados con los actuales [18, 61].

La movilidad puede significar la diferencia entre la vida y la muerte. La generación de energía es una de las características esenciales para la supervivencia de los microorganismos en el ambiente, de tal manera que son capaces de monitorear los cambios de "energía celular" y dirigir su movimiento hacia otros lugares próximos más favorables, respuesta denominada taxia de energía. Este comportamiento probablemente determina la estratificación y la migración activa de las células móviles en respuesta a cambios en el gradiente de donadores y/o aceptores de electrones [17].

Los movimientos tácticos son evidentemente ventajosos para un organismo móvil en su ambiente natural, puesto que capacitan al organismo para abandonar los ambientes desfavorables y permanecer en los que le son favorables [21].

Aspectos energéticos.

Las células requieren un continuo suministro de energía. Ésta es necesaria para la síntesis de moléculas complejas, la ejecución de trabajo mecánico y el transporte de sustancias a través de sus membranas.

En organismos procariotes, la fuente de energía para la rotación flagelar no involucra la hidrólisis de ATP, como en el caso del flagelo eucariote, sino un gradiente iónico transmembranal ya sea de protones, o de iones sodio en el caso de especies alcalófilas. Por lo tanto, el motor de rotación del flagelo bacteriano es un transductor energético que convierte la energía del gradiente electroquímico en trabajo mecánico [18].

2.3. Movimiento de bacterias peritricas.

Cuando bacterias peritricas se encuentran en ausencia de estímulos, es decir, en un medio ambiente uniforme, se puede observar un movimiento tridimensional aleatorio, formado por periodos de unos pocos segundos de natación en línea recta o ligeramente curvada (carreras o corridas), interrumpidos por breves periodos (décimas de segundo) de un movimiento angular caótico de la bacteria (viraje o cabeceo), tras de lo cual la célula entra en una nueva fase de natación en línea recta aunque con una nueva dirección [52, 24, 38, 18].

Debido a que el flagelo es una hélice izquierda, cuando los filamentos rotan en contra de la dirección de las manecillas del reloj (CCW), se genera una fuerza de propulsión. Los filamentos se ordenan en una trenza unitaria que sirve como propela a la célula, produciéndose el nado en una trayectoria relativamente lineal (ver figura 2.7, **a** micrografía de campo oscuro y **b** esquema de *Salmonella typhimurium*). Este conjunto de filamentos logra impulsar a la bacteria a una velocidad de hasta $40\mu\text{m/s}$ lo que equivale a aproximadamente 20 longitudes celulares por segundo. Sin embargo, al rotar los filamentos a favor de las manecillas del reloj (CW) la trenza se deshace llevando a la célula a presentar movimientos al azar en los que se reorienta sin que exista desplazamiento. En la rotación CW, cada filamento trabaja en diferentes direcciones por lo que no hay una velocidad neta (como en **c** y **d** de la figura 2.7 en *E. coli*). Por lo tanto, ya que la dirección de la rotación flagelar determina si la célula avanza o se reorienta, la frecuencia de cambio de dicha rotación será la base

de la respuesta táctica [61, 18].

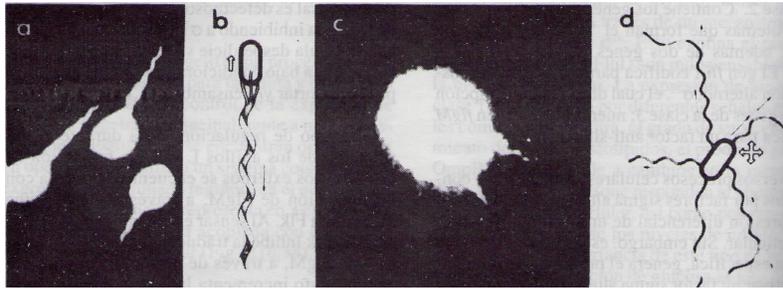


Figura 2.7: Rotación bidireccional de flagelos bacterianos [18].

Como se mencionó, la respuesta táctica se basa fundamentalmente en el control de la dirección de la rotación flagelar. Si existe un estímulo positivo, es decir, una sustancia atrayente, habrá un mayor tiempo de rotación CCW, extendiéndose así los intervalos de nado y por lo tanto siendo menos frecuentes los episodios de reorientación; de esta forma se obtiene un desplazamiento neto hacia el ambiente favorable. Por el contrario, en el caso de una sustancia repelente, habrá mayor tiempo de rotación en sentido CW. Estos cambios en la dirección de rotación del flagelo que producen un determinado comportamiento de nado, se encuentran regulados por un sistema de transducción de señales, que se encarga de convertir un estímulo extracelular en una señal intracelular dirigida a producir una respuesta [18].

2.3.1. Características de la *Escherichia coli*.

Tamaño y forma. La *E. coli* es una bacteria que tiene forma de bacilo, de aproximadamente $2.5\mu\text{m}$ de longitud y $1.8\mu\text{m}$ de diámetro. La *E. coli* tiene organelos externos, llamados pili que son filamentos delgados rectos, que le permiten adherirse a substratos específicos; está poblada de filamentos helicoidales largos, llamados flagelos, que la habilitan para nadar [52].

Habitat. La *E. coli* vive en el interior del intestino de animales de sangre caliente, incluyendo el hombre. Una vez que ha sido expulsada puede vivir en agua, sedimentos, excremento o suelo. En excremento se pueden encontrar alrededor de 10^{11} (100 billones) bacterias por centímetro cúbico, de las cuales 10^9 (1 billón) son *E. coli*. La mayoría de las otras bacterias son anaeróbicas y por lo tanto incapaces de vivir en presencia de oxígeno, fuera del cuerpo. Mientras que la *E. coli* puede vivir con o sin oxígeno, y por lo tanto sobrevivir hasta que encuentre otro huésped [52].

Patogenicidad. La mayoría pero no todas las cepas de *E. coli* son benignas, algunas de ellas causan enfermedades diarreicas y contribuyen a la mortandad infantil, otras causan severas o fatales complicaciones renales y neurológicas. La cepa K-12, entre otras cosas, ayuda a prevenir la invasión del intestino de levaduras y hongos: organismos que están muy lejos de ser benignos [52].

La *E. coli* fue identificada en la flora intestinal de niños por el pediatra alemán Theodor Escherich en 1885, quien la llamó *Bacteria coli común*. En 1920 se agregó *Escherichia*, debido a una revisión de su trabajo. La *E. coli* es un organismo utilizado para estudiar la fisiología bacteriana, por ser

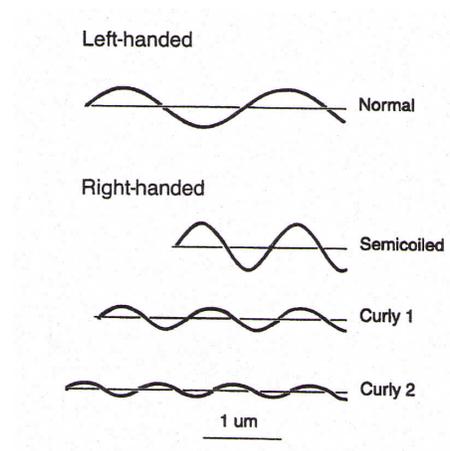


Figura 2.8: Formas que adquiere un flagelo en el movimiento de una bacteria [52].

muy accesible, generalmente benigna y cultivada fácilmente con medios químicos definidos [52].

Rastreo Bacteriano. Si observamos con un microscopio una suspensión de células *E. coli* móviles, es sorprendente su actividad, cada organismo casi se mueve con una rapidez del orden de 10 longitudes de su cuerpo por segundo. Su movimiento consiste en nado razonablemente recto en cierta dirección durante un segundo (aproximadamente paralela a su eje), giros erráticos en una pequeña fracción de segundo, y desplazamiento en una dirección diferente. Con el suficiente oxígeno, las células seguirán moviéndose, incluso cuando crecen y se dividen [52].

Cuando se observa la *E. coli* en ausencia de cualquier gradiente químico, se ve que se mueve alrededor del mismo lugar, experimentando nuevas direcciones en forma aleatoria. Las longitudes de intervalos sucesivos no están correlacionadas [52].

Estructura tridimensional del filamento. [52] El filamento es un polímero de una sola proteína llamada flagelina. Las subunidades de flagelina se disponen formando un cilindro hueco, de 11 columnas de protofilamentos. Dependiendo del enlace entre moléculas de flagelina, el protofilamento puede ser corto o largo. Si todos son de la misma longitud, el filamento es recto, si hay cortos y largos, el filamento es helicoidal: los protofilamentos cortos se encuentran dentro de la hélice.

Los flagelos son relativamente rígidos, porque pueden alternar entre distintas formas polimórficas [52]. Cuatro de estas formas se muestran en la figura 2.8. El filamento normal es levógiro, mientras que los filamentos semienrollado y enroscado son dextrógiros. Transformaciones entre las diferentes formas pueden incitarse por cambios en la estructura proteínica (es decir, por mutaciones en el gen de la flagelina), por cambios en la composición del medio circundante (por ejemplo pH-acidez o contenido iónico, sal), etc. **Cabeceo.** Recientes experimentos sugieren que cada motor cambia el sentido de su rotación de manera independiente [52]. Se ha observado que durante el cabeceo la transformación más frecuente de uno de los dos flagelos de la célula es de normal, a semicoiled, a curly 1, mientras el otro permanece en la forma normal, como se muestra en la figura 2.9.

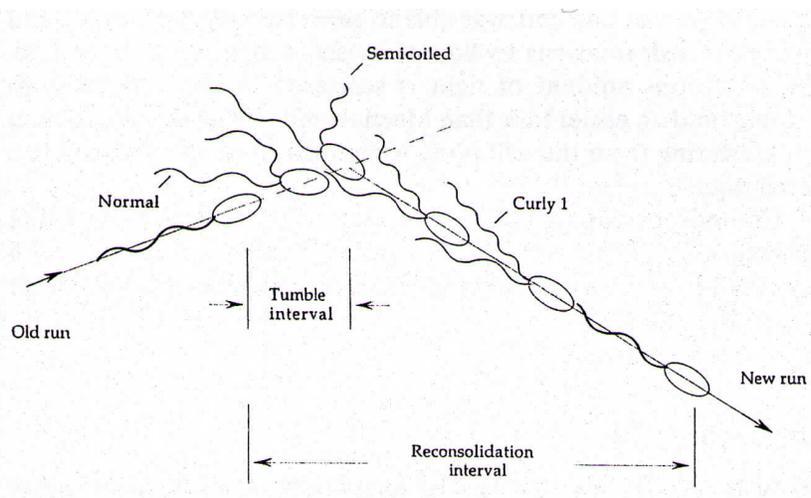


Figura 2.9: Esquema de cambios conformacionales durante el cabaceo [52].

2.4. Comportamiento de cuerpos microscópicos en medios acuosos.

Los procariotas no viven como células aisladas. La actividad constante y dinámica de los microorganismos mantiene un ambiente estratificado (estructurado) en el que las diferencias espaciales determinan la formación de biopelículas, tapetes microbianos, agrupaciones dispersas o agregados. Un procariota presenta todos los procesos "superiores", como elegir, discriminar, aprender, adaptarse y comunicarse "químicamente" con otros individuos, que son funciones biológicas distribuidas por toda la escala de la vida. Los microorganismos procarióticos pueden responder a diversas sustancias que provocan una respuesta de movimiento orientado [17].

El mundo "visto" a escala microscópica por una bacteria es radicalmente distinto al que nosotros podemos percibir y en el cual hemos podido desarrollar las leyes físicas de la naturaleza. Resulta de que nosotros somos más masivos y vivimos sobre la Tierra, mientras que las bacterias son microscópicas y viven en cierto medio. En su microambiente las condiciones son muy distintas de las que estamos acostumbrados. La viscosidad rige el movimiento (nado) de los microorganismos y afecta su permanencia o alejamiento en atrayentes o de repelentes del medio. Si la actividad flagelar cesa, la célula casi se detiene instantáneamente, diferencia más clara con las situaciones inerciales que experimentamos en nuestra vida cotidiana. Las bacterias desconocen el movimiento de empuje y deslizamiento, característicos de los peces; tienen la necesidad de nadar porque el agua circundante les resulta tan espesa y viscosa como la melaza a nosotros [38].

En el mundo nanoscópico todos los flujos son laminares, movimiento organizado que podemos observar al tratar de mezclar con una barra agitadora el fluido que se encuentra en un recipiente, y en el que capas sucesivas resbalan las unas sobre las otras y se detienen en cuanto se detiene la barra agitadora. Además, en caso de invertir el movimiento del agitador se obtiene casi la misma distribución de fluido inicial. Por el contrario, los flujos turbulentos se presentan al mezclar líquidos que en pocos segundos se arremolinan formando un patrón complejo, que no se interrumpe al detener la barra agitadora, además, no pueden obtenerse las distribuciones de fluido iniciales si se invierte la agitación.

Los microorganismos al moverse en el fluido se encuentran con dos tipos de resistencia, la inercia y la viscosidad. La inercia causa resistencia a la aceleración y es proporcional a la densidad del fluido; la viscosidad es una medida de la resistencia al desplazamiento y determina la fuerza necesaria para mover un objeto sólido a través de un fluido.

El número de Reynolds \mathbf{R} , definido por el ingeniero y físico Osborne Reynolds (1842-1912) en 1883, como el cociente entre los términos inerciales (fuerzas requerida para acelerar masas = masa \times aceleración = $l^3\rho_m v^2/R$) y los términos viscosos (fuerzas requeridas para generar corte = $\eta \frac{dv}{dx} \approx \eta l^3 v/R^2$) que siente cierto elemento de fluido de tamaño l que es arrastrado por el fluido con rapidez v y viscosidad dinámica η , hasta chocar con una esfera de radio R , como se muestra en la figura 2.10, resultando

$$\mathbf{R} = \frac{\text{términos inerciales}}{\text{términos de fricción}} = \frac{vR\rho_m}{\eta} \quad (2.1)$$

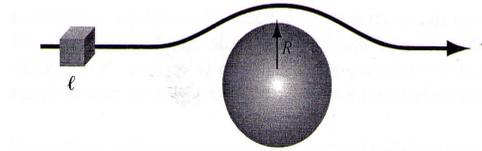


Figura 2.10: Volumen de fluido que se mueve alrededor de un obstáculo esférico [38].

Si \mathbf{R} es pequeño, domina el término de fricción: la agitación produce la menor respuesta posible, es decir, un flujo laminar, que se detiene inmediatamente después de que cese la fuerza externa. Cuando \mathbf{R} es grande, dominan los efectos inerciales: por ejemplo, el café sigue girando después de que hayamos dejado de agitarlo y el flujo es turbulento. Este criterio es aplicable a cualquier situación cuya geometría quede caracterizada por una escala de longitud R . Cuidadosos experimentos de O. Reynolds lo llevaron a concluir que el inicio de la turbulencia se produce cuando $\mathbf{R}=1000$. Para una ballena de 30m, nadando en agua a 10ms^{-1} , se tiene $\mathbf{R}=300\,000\,000$, pero para una bacteria de $1\,\mu\text{m}$, nadando a $30\mu\text{ms}^{-1}$, ¡Se tiene $\mathbf{R}=0.00003!!$ [38]. Para un microorganismo como la *E. coli* cuando nada en agua, el valor de \mathbf{R} es aproximadamente 10^{-5} . Cuando un humano rema lentamente en una alberca $\mathbf{R} \sim 10^5$. Nosotros somos mucho más grandes (l es mucho más grande) y nos movemos mucho más rápido (v es mucho mayor). Así que, en cierto sentido, nuestra experiencia en agua es diferente a la que experimenta la *E. coli*, por un factor de 10^{10} . Nuestra inercia es mayor y es más fácil para nosotros movernos de uno a otro de los extremos de una alberca [38].

En la física newtoniana, el movimiento correspondiente a la inversión temporal es una solución de las ecuaciones del movimiento con el mismo signo de la fuerza que en el movimiento original. En cambio, la fuerza de fricción viscosa no es invariante por inversión temporal: la trayectoria invertida en el tiempo no es solución de la ecuación de movimiento con el mismo signo de la fuerza. La ruptura de la invariancia por inversión temporal indica que algo irreversible está ocurriendo en el movimiento de fricción, lo cual no sorprende, pues la fricción es la disipación en un solo sentido, que provoca la transformación del movimiento ordenado en movimiento desordenado [38].

A los organismos suspendidos en el agua les puede resultar ventajoso nadar por sus alrededores. Sólo lo pueden hacer cambiando la forma de su cuerpo de una manera periódica, pero esto no es

tan sencillo. Supongamos que queremos desplazarnos en un fluido, posibles "remos" para llevar a cabo el movimiento, se muestran en la figura 2.11: (a) El elemento con aleta efectúa un movimiento recíproco, (b) El molinete hace girar una varilla helicoidal rígida, (c) El buje hace oscilar una varilla rectilínea rígida. Si una criatura con dos brazos (remos) fijos anclados al cuerpo celular por

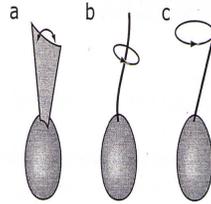


Figura 2.11: (Esquema) Tres nadadores [38].

bisagras (ver figura 2.12), intenta desplazarse a número de Reynolds pequeños, desciende y asciende sus remos (figura 2.11a), el cuerpo celular regresa a su posición inicial, sin importar la razón a la que estos desplazamientos son realizados. A bajos números de Reynolds, la aplicación de una fuerza a un fluido genera un movimiento que puede ser cancelado completamente aplicando la fuerza cambiada de signo e invertida con respecto al tiempo. Resultado que es cuestión de vida o muerte para los microorganismos. A diferencia de la situación en número de R pequeños, a R grande, el desplazamiento

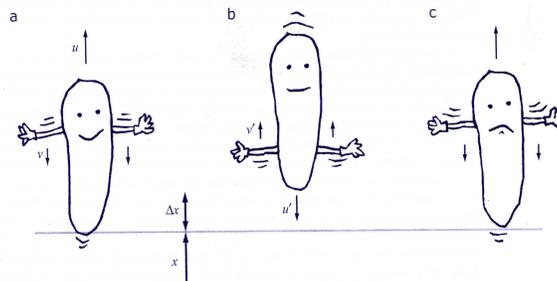


Figura 2.12: Un nadador microscópico intenta avanzar impulsando cíclicamente sus paletas arriba y abajo [38].

de empuje es más grande que el de restitución.

Veamos ejemplos de desplazamientos en flujos con número de Reynolds pequeño [38]:

Propulsión ciliar. Muchas células utilizan cilios, apéndices en forma de látigo de aproximadamente $5\text{-}10\mu\text{m}$ de longitud y 200nm de diámetro, para generar un empuje neto. Las células móviles (como el *Paramecium*) utilizan cilios para desplazarse. El movimiento indicado en la figura 2.13 es típico: periódico pero no recíproco, en ella se muestra un cilio que inicialmente está paralelo a la superficie de la célula, apuntando hacia la izquierda. Durante el movimiento impulsor (izquierda), el cilio se desplaza perpendicularmente a su eje, mientras que durante el movimiento recuperador (derecha) la mayor parte de él se desplaza aproximadamente paralelo a su eje. Así, el movimiento del fluido producido por el movimiento impulsor sólo queda cancelado parcialmente por el flujo hacia

atrás producido por el movimiento recuperador. La diferencia entre ambos flujos es el bombeo neto producido en un ciclo. De manera que el cilio produce un avance neto al impulsar el fluido a lo largo de la superficie, realizando un movimiento que es periódico pero no recíproco, es decir, no es reversible en el tiempo.

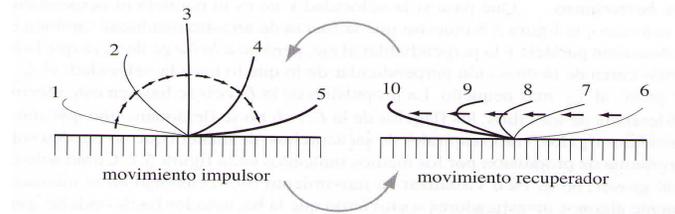


Figura 2.13: (Esquema) Ciclo ciliar [38].

Flagelos bacterianos. El desplazamiento de las bacterias por medio de flagelos se puede entender considerando una varilla fina arrastrada con velocidad \mathbf{v} que no es ni paralela ni perpendicular a su eje. Caso en que la fuerza \mathbf{f} necesaria para arrastrarla es la resultante de dos fuerzas \mathbf{f}_{\parallel} y \mathbf{f}_{\perp} procedentes de las componentes de \mathbf{v} paralela y perpendicular al eje de la varilla. Incluso si v_{\parallel} y v_{\perp} tienen el mismo módulo, tal como se supone en la figura 2.14, las componentes respectivas de \mathbf{f} no serán iguales, por lo cual \mathbf{f} no será paralela a \mathbf{v} , véase la figura 2.14; porque la viscosidad ζ_{\perp} es más grande que la viscosidad ζ_{\parallel} . La propulsión de la *E. coli* se basa en este efecto. A diferencia de los cilios los flagelos no se flexionan, sino que son objetos helicoidales rígidos, como espirales de sacacorchos, de manera que no pueden solucionar el problema de propulsión realizando el movimiento de los cilios (figura 2.13). Los flagelos bacterianos tienen un grosor de 20nm por lo que es difícil visualizar

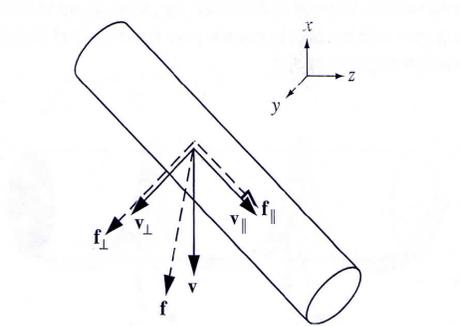


Figura 2.14: Esquema de la fuerza impulsora en bacterias flagelares [38].

su movimiento tridimensional en el microscopio. En 1973, H. Berg y R. Anderson [38] sugirieron que la bacteria hacía girar el flagelo desde su base con un movimiento rotacional rígido, idea que era difícil poner a prueba: es difícil juzgar el carácter tridimensional de un movimiento observado en el microscopio. M. Silverman y M. Simon [38] utilizaron una cepa mutante de *E. coli* que carece de filamento y sólo tiene el gancho. Anclaron las células a un cubreobjeto de vidrio por sus ganchos, de modo que el motor flagelar hacía girar el cuerpo entero de las bacterias, un proceso fácilmente observable en el microscopio. En la actualidad sabemos que el motor flagelar es una maravilla de la

nanobiología, un motor rotatorio de tan sólo 45nm de ancho [38].

Ciertamente, el movimiento rotatorio satisface el criterio de ser periódico pero no recíproco. Y estamos familiarizados con otros objetos helicoidales rotatorios que desarrollan un impulso a lo largo del eje, como las hélices de submarinos y barcos. Pero los detalles son muy diferentes en el caso de bajo número de Reynolds. La figura 2.15 muestra un esquema de la situación. El motor flagelar hace girar un objeto helicoidal rígido (que representa al flagelo) respecto a su eje. Dos segmentos cortos de la hélice han sido singularizados para su estudio. La fuerza neta $d\mathbf{f}$ ejercida sobre un segmento corto por sus dos vecinos debe contrarrestar la fuerza de resistencia viscosa sobre dicho segmento. Así, para que la hélice describa el movimiento rotatorio deseado, $d\mathbf{f}$ debe ser el vector mostrado en la figura 2.15. Al sumar todas las contribuciones de cada segmento de la varilla, vemos que las componentes en el plano xy se cancelan (pensemos en los segmentos correspondientes en el extremo opuesto de la hélice cuyos vectores velocidad apuntan hacia arriba). Pero $d\mathbf{f}$ también tiene una pequeña componente a lo largo de la dirección $-\hat{\mathbf{z}}$, y las $d\mathbf{f}_z$ no se cancelan. Por lo tanto, se debe aplicar una fuerza hacia la izquierda para hacer girar el flagelo en su lugar (además de un momento con respecto al eje) [38].

Supongamos que el flagelo no está anclado a un objeto fijo sino ligado al extremo derecho de una bacteria. Entonces, como no hay nada que proporcione una fuerza neta hacia la izquierda, la rotación del flagelo impulsará la bacteria hacia la derecha. Es interesante observar que se han hallado bacterias mutantes con flagelos rectilíneos, que giran y giran pero no consiguen desplazarse.

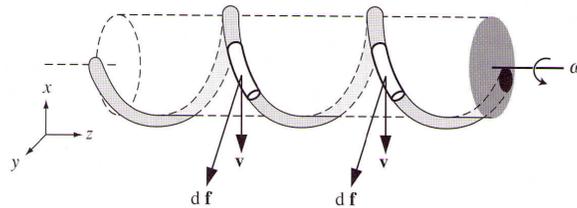


Figura 2.15: Esquema de la propulsión bacterial [38].

Si la célula (con sus flagelos) nada con una rapidez constante (sin acelerar o desacelerar), ésta no experimenta fuerza neta; por lo tanto, el empujón generado por la hélice rotatoria debe ser balanceado por la resistencia sobre el cuerpo. El mismo argumento aplica a la rotación: la torca externa por los motores flagelares sobre los filamentos debe balancearse con el contragiro (rotación) opuesta del cuerpo de la célula. Sin embargo, ya que el cuerpo es relativamente grande, éste gira relativamente despacio. Cuando la *E. coli* nada, el cúmulo de flagelos gira de alguna manera cerca del orden de 100 Hz, mientras que el cuerpo celular se enrosca de otra manera a 10 Hz; la célula con sus flagelos se mueve directamente con rapidez del orden de 10 longitudes por segundo. Para un ser humano, 10 longitudes de cuerpo por segundo es cerca de 64.4 km por hora!!! [38].

3

Modelos del movimiento colectivo.

Existen estudios teóricos y experimentales del movimiento organizado de un número muy grande de " partículas " auto-propulsadas (usualmente, pero no siempre organismos vivos) [6], [7]. En los últimos 10 años, muchas de las características universales de este tipo de comportamiento han sido identificadas y entendidas, utilizando técnicas originalmente desarrolladas para materia condensada en equilibrio y física estadística.

3.1. Modelo de materia condensada

Uno de los modelos para describir el movimiento colectivo consiste en plantear analogías con sistemas de materia condensada en equilibrio, en las que se asocian distintas " fases " al movimiento de las partículas por sus simetrías [6]. Las fases estudiadas teóricamente tienen exactamente las mismas simetrías que alguna fase en equilibrio (por ejemplo, ferromagnetos, y cristales líquidos). Se ha podido concluir que todos los cúmulos en movimiento organizado presentan la misma fase, independientemente de sus constituyentes, tienen la misma "hidrodinámica".

Estos sistemas son diferentes a los sistemas en equilibrio, debido a la auto-propulsión fuera del equilibrio que es intrínseca de los " organismos " constituyentes. La diferencia es más dramática en la fase más simple, en que todos los organismos en promedio se mueven en la misma dirección, llamado " vector-ordenado " o comportamiento ferromagnético [6].

Vicsek y colaboradores diseñaron un modelo de simulación numérica para el movimiento colectivo [6], con las siguientes características:

1. Un número muy grande (un flock) de partículas puntuales ("boids") moviéndose en el tiempo a través de un espacio de dimensión $d(=2,3,\dots)$ intentando a todo tiempo "seguir"(es decir, moverse en la misma dirección) a sus vecinos.

2. Las interacciones son puramente de corto-alcance: cada "boid", solamente responde a sus vecinos, definidos como aquellos "boids" dentro de una distancia fija R_0 , que se asume independiente de L , el tamaño lineal del flock.
3. El "seguimiento" no es perfecto: los "boids" tienen errores en todo tiempo, que son modelados como un ruido estocástico. Ruido que se supone que tiene solamente correlaciones espacio-temporal de corto-alcance.
4. El modelo fundamental tiene simetría rotacional completa: el cúmulo de "partículas" puede moverse en cualquier dirección, todas son igualmente probables (medio isotrópico).

Cualquier modelo que incorpore estas características generales pertenece a la misma "clase universal", en el sentido que el nombre es usado en fenómenos críticos u física de materia condensada.

Por supuesto, muchos organismos no se mueven en un ambiente invariante de rotación, porque cada organismo individual obtiene su dirección de pistas/señales de su medio ambiente -sol, viento, océano, corrientes de aire, gradientes de temperatura, campo magnético de la Tierra, etc.- identificadas como "compás". Hay muchos ejemplos en la naturaleza en los que el comportamiento colectivo y la interacción entre partículas domina sobre campos impuestos externamente.

Como se verá más adelante, las cuatro consideraciones del modelo de simulación, se encuentran en las bases de la ecuación tipo Boltzmann que se utiliza en el presente trabajo.

3.2. Modelo hidrodinámico

Para evitar resolver el problema de muchas (pero muchas!!) ecuaciones de movimiento de las 10^{23} moléculas constituyentes de un fluido, se recurre a la *hidrodinámica*, escribiendo un conjunto de ecuaciones continuas que describen la variación suave/lenta de la densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$ y la velocidad $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ -ecuaciones Navier-Stokes que describe fluidos newtonianos- con ellas no es necesario describir la dinámica microscópica. Con las ecuaciones macroscópicas y parámetros fenomenológicos (conductividad térmica, compresibilidad, etc., deducidos de experimentos u ocasionalmente, a costa de un esfuerzo inmenso, calculados de modelos microscópicos) se pueden predecir resultados de todos los experimentos que exploren escalas de longitud grande y tiempo mucho más grande que el tiempo microscópico, resolver estas ecuaciones es una tarea más simple que resolver la dinámica microscópica hidroFlocks:ref.

Las ecuaciones continuas se escriben considerando sólo los términos "relevantes" que cumplan con las simetrías y leyes de conservación del problema. "Relevantes" significa que son términos importantes en las escalas de la descripción macroscópica. En la práctica, esto significa un "desarrollo en gradientes", en el que se conservan los ordenes de derivadas espaciales y temporales más pequeño posible. Por ejemplo, para una variación espacial lenta $\eta_s \nabla^2 \vec{v} \gg \gamma \nabla^4 \vec{v}$, se conserva sólo el término más grande.

Dada una simetría importante, existe la "fase" para dicho comportamiento del sistema. En el movimiento de partículas auto-propulsadas se tienen dos fases: "ferromagnetismo" para el desplazamiento ordenado y el estado desordenado se describe como "paramagnetismo".

En mecánica estadística del equilibrio se clasifican las diferentes fases de la materia por las simetrías fundamentales que rompen. Por ejemplo, los sólidos cristalinos difieren de los fluidos (líquidos y gases) rompen las simetrías orientacional y traslacional. Hasta ahora, los modelos hidrodinámicos han sido formulados para tres fases: paramagnetismo, ferromagnetismo y nemáticos.

Veamos en que consiste la formulación hidrodinámica del comportamiento ferromagnético en un ambiente isotrópico (completamente invariante rotacional).

- El sistema que se quiere modelar es cualquier colección de un número muy grande (N) de organismos (identificados como "pájaros") en un espacio d -dimensional, con cada organismo tratando de moverse en la misma dirección que sus vecinos inmediatos.
- Se asume que los organismos no son influidos por el medio ambiente, entonces, no hay dirección preferida intrínseca en la que deseen moverse. Se mueven en cualquier dirección seleccionada por sus vecinos.
- Sin embargo, la navegación de cada organismo no es perfecta, esto ocasiona algunos errores en el intento por seguir a sus vecinos. Se considera el caso en el que el promedio de los errores es cero, por ejemplo, en 2 dimensiones, para algún pájaro es igualmente probable equivocarse a la derecha y a la izquierda de la dirección seleccionada por los vecinos. También se asume que no tienen correlaciones temporales largas, por ejemplo, un pájaro que se ha equivocado a la derecha al tiempo t tiene la misma probabilidad de equivocarse a la derecha e izquierda a un tiempo t' mucho más grande que t .
- El modelo incluye interacciones atractivas o repulsivas entre los pájaros, restringiendo su campo de visión a aquellos pájaros que están enfrente de ellos.

Las simetrías del modelo son:

Invariancia traslacional significa que el desplazamiento de posiciones del cúmulo de pájaros completo no tiene significado físico. Ya que el espacio en que se mueve se considera homogéneo.

La invariancia rotacional se debe a que los pájaros carecen de la influencia de un "compás", así que todas las direcciones del espacio son equivalentes. Las ecuaciones hidrodinámicas que resultan no tienen ninguna dirección especial. Todas las direcciones deben ser seleccionadas espontáneamente por el movimiento y estructura espacial del cúmulo.

La única ley de conservación es del número de pájaros: no se permite que nazcan o mueran pájaros, la ecuación de continuidad refleja esta suposición

$$0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\rho) . \quad (3.1)$$

Para reducir la complejidad de la ecuación de movimiento, realizan una expansión espacio-temporal de gradientes y conservan sólo los términos de orden más bajo en gradientes y derivadas

temporales de \mathbf{u} y ρ , simplificación motivada y justificada por el deseo de considerar distancias grandes y tiempos prolongados en el movimiento de partículas auto-propulsadas, así obtienen la ecuación tipo Navier-Stokes siguiente

$$\begin{aligned} & \partial_t \mathbf{u} + \lambda_1 (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \lambda_2 (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + \lambda_3 \nabla (|\mathbf{u}|^2) \\ & = \alpha \mathbf{u} - \beta |\mathbf{u}|^2 \mathbf{u} - \nabla P + D_B \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + D_T \nabla^2 \mathbf{u} + D_2 (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{f}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde P es la presión que tiende a mantener la densidad local $\rho(\mathbf{r})$ en su valor medio ρ_0 y $\delta\rho = \rho - \rho_0$, es decir,

$$P(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n (\rho - \rho_0)^n. \quad (3.3)$$

Las constantes β, D_B, D_T, D_2 son positivas, el parámetro α en la fase desordenada es $\alpha < 0$ y será $\alpha > 0$ en el estado desordenado.

La ecuación para el campo de velocidades \mathbf{u} (3.2), tiene en el lado izquierdo la derivada local y el análogo a la derivada convectiva (términos que contienen los parámetros λ) de las ecuaciones de Navier-Stokes de un fluido. Los parámetros $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ son fenomenológicos distintos de cero, cuyos valores son determinados por reglas microscópicas. Las constantes $D_{B,T,2}$ son constantes de difusión (o viscosidades). \mathbf{f} es una fuerza impulsora aleatoria que representa el ruido gaussiano con correlaciones de ruido blanco

$$\langle f_i(\mathbf{r}, t) f_j(\mathbf{r}', t') \rangle = C \delta_{ij} \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (3.4)$$

donde C = constante, i, j son coordenadas cartesianas, d es la dimensión del espacio en que se mueven las partículas.

Para el caso estacionario y homogéneo la ecuación de la velocidad hidrodinámica (3.2) es

$$0 = \alpha \mathbf{u} - \beta |\mathbf{u}|^2 \mathbf{u}, \quad (3.5)$$

ésta tiene dos soluciones, la solución $u = 0$ representa la situación en la que, aunque los pájaros se encuentren en movimiento (rapidez individual $v \neq 0$) la rapidez promedio es cero, característica de una fase paramagnética en la que los pájaros tienen un movimiento desordenado; la segunda de las solución, $u = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{1/2}$ que implica que la rapidez promedio es la misma y por lo tanto tienen un movimiento ordenado ($\alpha > 0$) en cierta dirección, situación que se presenta en la fase ferromagnética.

Uno de los objetivos de esta tesis es obtener la ecuación tipo Navier-Stokes, ecuación (3.2), a partir de la teoría cinética, más adelante se encuentra el desarrollo.

4

Modelo Cinético

En la primera sección de este capítulo se introducen las ideas fundamentales de la Teoría Cinética de gases. En la segunda sección se definen las analogías y las condiciones en las que se aplica la teoría cinética de gases al movimiento de bacterias con flagelos.

4.1. Elementos básicos de Teoría Cinética de gases.

Cuando la densidad de un gas es lo suficientemente baja, de modo que el camino libre medio es lo suficientemente pequeño comparado con las dimensiones características de la geometría del flujo, los resultados obtenidos en la dinámica de fluidos requieren correcciones que se vuelven cada vez más importantes conforme el grado de rarefacción (densidad más baja) se incrementa. Situación en la que se requiere una aproximación alternativa, la representación cinética de la materia, donde el estado del sistema completo se describe con una densidad de probabilidad o función de distribución adecuada que representa el estado microscópico de los elementos que interactúan, ésta es la variable dependiente en modelos cinéticos. Las propiedades macroscópicas (observables) se calculan como momentos pesados por la función de distribución.

La teoría cinética es capaz de derivar los coeficientes de transporte (datos experimentales en la descripción macroscópica), utilizando las propiedades y el comportamiento de las moléculas del gas. La teoría cinética se basa en el concepto de que un "gas" es una colección de muchas partículas, que son afectadas por sus alrededores y por colisiones con otras partículas. Las partículas que se consideran tienen las siguientes características:

- son puntos, sin estructura interna o grados de libertad internos (los gases perfectos son monoatómicos)
- ejercen fuerzas sobre otras, solamente cuando sus centros están a una distancia pequeña comparada con la separación promedio (la región en que las partículas interactúan es llamada la

esfera de influencia).

- en el exterior de la esfera de influencia obedecen las leyes de la mecánica clásica (su movimiento es descrito por una ecuación de movimiento no relativista).

En un gas las moléculas se encuentran libres y la mayoría del tiempo están separadas por distancias que son grandes comparadas con sus dimensiones. Se mueven en línea recta hasta que dos (o más), lleguen a acercarse, y entonces, ocurra (algo como) una colisión, después de que se separan, se mueven con velocidades diferentes.

En gases perfectos, la energía calorífica es interpretada como energía traslacional aleatoria de las moléculas. Sin embargo, las moléculas que tienen estructura interna, pueden almacenar energía en sus grados internos de libertad (energía cinética de rotación o vibración). Aunque la teoría cinética clásica hace predicciones específicas de como la energía cinética es repartida o dividida entre todos los grados de libertad, los resultados no coinciden con observaciones, excepto en el caso de las moléculas más simples. Característica que muestra los límites de la teoría cinética clásica. La fricción se desprecia totalmente en las interacciones moleculares. En teoría cinética, la conversión de trabajo mecánico en calor por fricción es interpretada como una conversión de la mayoría de la energía traslacional en movimiento molecular aleatorio.

Los sistemas se modelan en un marco de causalidad determinista, lo que significa que una vez que se conozca la causa, el efecto es identificado en forma determinista. A menos que algún ruido externo intervenga.

4.1.1. Definiciones

Consideremos un gas monoatómico, formado de partículas que interaccionan entre ellas a través de colisiones moleculares, mecanismo que será el más importante en la descripción de los fenómenos de transporte involucrados. Caracterizamos dichas colisiones con la llamada " trayectoria libre media ", que es la distancia promedio que viajan las partículas del fluido sin sufrir colisiones entre ellas ni con las paredes. Sea σ la sección eficaz de colisión entre las moléculas, si éstas tienen un tamaño característico a (diámetro de esfera dura o alcance del potencial intermolecular, distancia microscópica), la sección será $\sigma \sim a^2$. Si hay n moléculas por unidad de volumen en el fluido y L es la dimensión lineal del volumen del sistema (longitud macroscópica), nLa^2 será el número de colisiones en la distancia L . La trayectoria libre media λ se estima dividiendo la distancia L por el número de colisiones que sufren las moléculas al viajar dicha distancia, es decir

$$\lambda \sim \frac{L}{na^2L} \sim \frac{1}{na^2}.$$

La cantidad K_n

$$\frac{\lambda}{L} \sim \frac{1}{na^2L} = K_n,$$

se le conoce como número de Knudsen y es la frecuencia de colisiones.

En un gas diluido estas distancias son de diferente orden de magnitud y están ordenadas como sigue

$$a \ll \lambda \ll L ,$$

para un gas diluido típico $T_0 \sim 273\text{K}$ y una atmósfera de presión, se tiene $a \sim 10^{-8}\text{cm}$, $\lambda \sim 10^{-5}\text{cm}$, $L \sim 1\text{cm}$.

A cada distancia le corresponde un tiempo característico, que se puede obtener dividiendo por una velocidad típica, que podría ser la velocidad del sonido en el gas v_s , o la velocidad térmica $\left(\frac{k_B T}{m}\right)^{1/2}$:

1. t_c es el tiempo que una partícula tarda en viajar una distancia microscópica, como el diámetro de esfera dura (podría tomarse como el tiempo de duración de una colisión),
2. τ tiempo libre medio, que mide el tiempo promedio entre colisiones,
3. t_{macro} es el tiempo que la partícula tarda en viajar la distancia macroscópica característica del problema,

estos tiempos también difieren en varios ordenes de magnitud

$$t_c \sim 10^{-12}\text{s} \ll \tau \sim 10^{-9}\text{s} \ll t_{macro} \sim 10^{-4}\text{s}.$$

La primera desigualdad $t_c \ll \tau$ indicaría que el gas es diluido, ya que las partículas pasarían la mayor parte del tiempo sin chocar. La desigualdad $\tau \ll t_{macro}$ indicaría que en tiempos macroscópicos, las partículas han tenido muchas colisiones.

Las escalas de tiempo permiten ver la *evolución del sistema* en las siguientes etapas bien definidas:

1. La *etapa cinética*, para tiempos $0 < t \leq \tau$, donde se hace la descripción en términos de la función de distribución y ésta satisface la ecuación de Boltzmann. Se supone que las colisiones binarias entre las partículas son dominantes y que no están correlacionadas. En este régimen, la función de distribución y todas las funciones que dependen de la posición y de la velocidad molecular cambian mucho con el tiempo.
2. La *etapa hidrodinámica* $t \gg \tau$, donde el gas admite una descripción en términos de variables macroscópicas como densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$, velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ y energía $e(\mathbf{r}, t)$. Estas variables corresponden a cantidades que aún en el régimen cinético no cambian como resultado de las colisiones, tal es el caso de las variables conservadas. En forma cualitativa los cambios producidos por inhomogeneidades espaciales, ΔA es el cambio de las variables hidrodinámicas antes mencionadas, entonces

$$\mu = \frac{\Delta A}{A} K_n = \frac{\Delta A}{A} \frac{1}{na^2 L},$$

mide el cambio relativo de la variable A en distancias del orden de la trayectoria libre media. En el caso en que $\mu \ll 1$, las variables conservadas casi no cambian y eventualmente se llegará al estado de equilibrio. El parámetro μ se conoce como parámetro de uniformidad, ya que mide los cambios espaciales en las variables dinámicas y se anula cuando el sistema es uniforme.

3. Para tiempos posteriores a t_{macro} , $t \gg t_{macro}$, existen procesos lentos hasta llegar al equilibrio. De manera esquemática, la evolución del sistema puede describirse en la siguiente forma

etapa cinética – etapa hidrodinámica – equilibrio termodinámico

$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \rightarrow$ cuando $(t \gg \tau)$: $\rho(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, $e(\mathbf{r}, t) \rightarrow$ cuando $(t \gg t_{macro})$: $n=\text{cte.}$, $T=\text{cte.}$

Espacio fase El movimiento de una partícula puede describirse completamente en términos de sus coordenadas espaciales \mathbf{r} y su velocidad \mathbf{v} , porque las leyes de la mecánica clásica son tales, que el conocimiento de \mathbf{r} y \mathbf{v} a cualquier instante, permite predecir los valores de esas variables a cualquier otro tiempo. La partícula puede representarse con un solo punto en un sistema de Coordenadas (\mathbf{r}, \mathbf{v}) , entonces especificar su posición y velocidad es equivalente a especificar un punto en el espacio de seis dimensiones, llamado espacio fase o espacio μ , como el mostrado en la figura 4.1. Como la posición y la velocidad cambian en el tiempo, el punto que representa a la partícula se mueve a través del espacio fase. En general, la partícula se puede representar por un punto en un espacio de q dimensiones, donde q es el número de variables independientes (posición y velocidad o ímpetu) necesarias para especificar su configuración y movimiento.

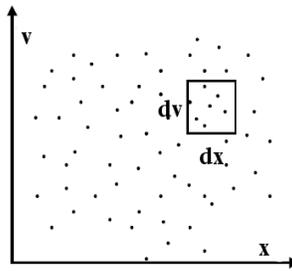


Figura 4.1: Espacio fase y una celda en dicho espacio

Las propiedades macroscópicas de un gas (sistema) pueden obtenerse con la función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Esta función puede determinarse a partir de una ecuación integro-diferencial primero dada por Boltzmann y más tarde por Maxwell, que es definida de tal manera que

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}d\mathbf{v}$$

es el número de partículas que al tiempo t se encuentran en el elemento de volumen $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ que forma la celda del espacio fase mostrada en la figura 4.1. En otras palabras, N es el número de partículas con velocidades en $\{\mathbf{v}, \mathbf{v}+d\mathbf{v}\}$ localizadas en el intervalo $\{\mathbf{r}, \mathbf{r}+d\mathbf{r}\}$ al tiempo t . Con esta definición, se introduce un cierto nivel de imprecisión, ya que ahora el estado de cada partícula se conoce con un error de $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$.

De la definición anterior, se puede obtener el número total de partículas del sistema si se integra

$$N = \int \int \int_V \int \int \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}d\mathbf{v}, \quad (4.1)$$

donde los posibles valores para \mathbf{r} están limitados por el volumen V , y los valores de las tres componentes del vector velocidad están entre $-\infty$ a ∞ . Esto implica que los movimientos relativistas de las partículas son ignorados, que en ciertos casos pueden tener un papel importante.

4.1.2. Ecuación de Boltzmann.

Para construir la ecuación de evolución de $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ tomaremos el cambio producido por el hecho de que la partícula se mueve con velocidad \mathbf{v} y en general en presencia de una fuerza externa \mathbf{F} , de modo que el cambio en la función de distribución conforme pasa el tiempo se puede expresar en términos de su derivada total:

$$\begin{aligned} \frac{Df(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{Dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde la aceleración debida a un campo externo, según la segunda ley de Newton es $\mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}}{m}$, m es la masa de las partículas. A esta derivada temporal se le conoce como el término de arrastre de la ecuación de Boltzmann.

La evolución espacial y temporal de f , se puede obtener también considerando un volumen fijo Ω del espacio fase que contiene

$$N_{\Omega} = \int \int_{\Omega} f d\mathbf{x} d\mathbf{v} \quad (4.3)$$

partículas. Introducimos dA_{Ω} como un elemento superficial (5-dimensional) del espacio fase con un vector normal \mathbf{n} , el vector del espacio fase $\xi_A = \{x_k, v_k\}_A$ ($A=1,2,\dots,6, k=1,2,3$), y la velocidad en el espacio fase $\dot{\xi}_A = \{\dot{x}_k, \dot{v}_k\}_A$. Todas las partículas que cruzan dA_{Ω} durante el tiempo t contribuyen al cambio de N_{Ω} e integrando sobre la superficie $\partial\Omega$ de Ω resulta

$$\frac{dN_{\Omega}}{dt} = \frac{d}{dt} \int \int_{\Omega} f d\mathbf{x} d\mathbf{v} = - \oint_{\partial\Omega} \dot{\xi}_A n_A f dA_{\Omega}, \quad (4.4)$$

el teorema de Gauss permite convertir la integral de superficie en una integral de volumen, la derivada temporal puede escribirse dentro de la integral, ya que Ω es constante en el tiempo

$$\int \int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{x} d\mathbf{v} = - \int \int_{\Omega} \frac{\partial \dot{\xi}_A f}{\partial x_A} d\mathbf{x} d\mathbf{v} \quad (4.5)$$

$$\int \int_{\Omega} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \dot{\xi}_A f}{\partial x_A} \right] d\mathbf{x} d\mathbf{v} = 0. \quad (4.6)$$

La ecuación anterior debe cumplirse para cualquier volumen de espacio fase Ω , entonces la expresión dentro de los paréntesis cuadrados debe anularse. Utilizando que $\xi_A = \{x_k, v_k\}_A$ y $\dot{\xi}_A = \{\dot{x}_k, \dot{v}_k\}_A = \{v_k, \dot{v}_k\}_A$, resulta

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_k \frac{\partial f}{\partial x_k} + \frac{\partial (\dot{v}_k f)}{\partial v_k} = 0. \quad (4.7)$$

Como x_k y v_k son independientes en el espacio fase $\frac{\partial v_k}{\partial x_k} = 0$. La aceleración de las partículas, es debida a fuerzas externas (G_k), como la gravedad y fuerzas de interacción con otras partículas (W_k), entonces $\dot{v}_k = G_k + W_k$. Por lo general las fuerzas externas que se toman en cuenta son independientes de la velocidad $\frac{\partial G_k}{\partial v_k} = 0$, finalmente se obtiene

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_k \frac{\partial f}{\partial x_k} + G_k \frac{\partial f}{\partial v_k} = \mathfrak{S} \quad \text{con} \quad \mathfrak{S} = - \frac{\partial W_k f}{\partial v_k}, \quad (4.8)$$

\mathfrak{S} describe el cambio de la densidad de fase debido a la interacción entre partículas, es decir, colisiones. Como el tiempo de una colisión es muy corto, y es imposible resolver temporalmente en una escala lo suficientemente adecuada, la idea de la ecuación de Boltzmann es considerar una escala temporal donde las colisiones aparecen como cambios de velocidad instantáneos, \mathfrak{S} se obtiene basándose en esta idea.

El cambio de la función de distribución producido por la **interacción de las partículas** (\mathfrak{S}) se obtiene tomando en cuenta las siguientes hipótesis:

Sólo se consideran colisiones binarias Lo cual se justifica en un gas diluido, en el que la trayectoria libre media es grande comparada con el tamaño de las moléculas, la colisión entre tres o más partículas es poco probable, así que, puede ser ignorada. Además las partículas del gas son monoatómicas (hipótesis molecular), sólo habrá intercambio de energía cinética en la colisión.

f se puede considerar constante Tienen que ocurrir muchas colisiones para que f cambie significativamente (no cambia durante el tiempo de una colisión $t - t_c = (v/r_0)^{-1}$) [44], f también es constante en el rango de las fuerzas interatómicas d [47].

Las velocidades de dos partículas no están correlacionadas Hipótesis que introdujo Boltzmann con el nombre de Caos molecular o "Stosszahl Ansatz". Que consiste en que dos partículas cuando chocan al tiempo t , no se acuerdan si han chocado antes, entonces sus velocidades son estadísticamente independientes, las colisiones aparecen como cambios instantáneos en la velocidad. En el instante t a cada punto en el espacio fase (\mathbf{x}), los valores de f para diferentes velocidades son independientes. Aunque ésta es una hipótesis externa, existe justificación física en un sistema diluido, ya que en este tipo de sistemas es mayor el tiempo entre colisiones que el tiempo que dura la colisión misma, por lo que las partículas están lo suficientemente no relacionadas entre sí.

Para obtener el cambio de la función de distribución debido a los encuentros entre partículas, se considera que el gas interactúa mediante un potencial esféricamente simétrico, y entonces las velocidades antes y después de la colisión notan la presencia de otra partícula, cuando su distancia relativa r es tan grande que la interacción potencial $\phi(r)$ es prácticamente cero. Consideremos dos partículas de masa m , con velocidades antes de la colisión \mathbf{v} y \mathbf{v}_1 , y cuya velocidad relativa es $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$. Después de la colisión, las partículas tendrán las velocidades

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} + \mathbf{a}, \quad \mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + \mathbf{b}, \quad \mathbf{g}' = \mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1,$$

los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} se determinan tomando en cuenta la conservación del ímpetu y de la energía, de lo cual resulta $\mathbf{b} = -\mathbf{a}$ y $\mathbf{a} = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}$, donde el vector unitario $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{a}}{a}$, es llamado el vector de colisión. Los vectores después de la colisión toman la siguiente forma

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{g})\mathbf{k}, \quad \mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{g})\mathbf{k}, \quad \mathbf{g}' = \mathbf{g} - 2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{g})\mathbf{k}. \quad (4.9)$$

Si se multiplican las expresiones anteriores por \mathbf{k} , \mathbf{g} y \mathbf{g}' , se puede obtener

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}' = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{g} - \mathbf{g}'}{|\mathbf{g} - \mathbf{g}'|} \quad \text{y} \quad g' = g,$$

entonces, la magnitud de la velocidad relativa no cambia y el vector \mathbf{k} divide en dos el ángulo entre \mathbf{g} y \mathbf{g}' , ver la figura 4.2, en ella también se introduce el ángulo de colisión Θ como el ángulo entre \mathbf{g} y \mathbf{k} , así que $\mathbf{k} \cdot \mathbf{g} = g \cos(\Theta)$. Se pueden expresar las velocidades antes de la colisión en términos de las cantidades después de la colisión

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}' - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}')\mathbf{k}, \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}'_1 + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}')\mathbf{k}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{g}' - 2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}')\mathbf{k}.$$

La conservación del ímpetu en la colisión, requiere que tal colisión sea en un plano, condición que

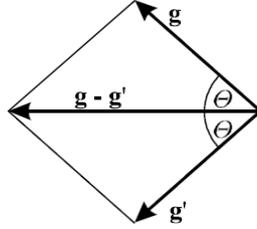


Figura 4.2: Velocidades relativas y ángulo de colisión Θ . \mathbf{k} es el vector unitario en la dirección de $(\mathbf{g}-\mathbf{g}')$ [?]

se cumple con

$$\mathbf{g} \times \mathbf{r} = \mathbf{g}' \times \mathbf{r}' \quad \text{ó} \quad gb = g'b' \quad \Rightarrow \quad b' = b, \quad (4.10)$$

donde \mathbf{r} denota la distancia relativa entre las partículas y \mathbf{b} es el parámetro de colisión que proporciona la distancia perpendicular de la partícula a la velocidad relativa \mathbf{g} . La figura 4.3 muestra el parámetro de colisión b , las velocidades relativas \mathbf{g} y \mathbf{g}' para la colisión de dos moléculas de diámetro d . En ella también se puede observar que en el caso de esfera dura el ángulo y el parámetro de colisión se relacionan como

$$\Theta_{HS} = \arcsin \frac{b}{d}.$$

En general, la relación entre Θ , b y g depende del potencial de interacción $\phi(r)$. Conocer los detalles de la colisión permite calcular el cambio de la densidad de fase $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ provocado por las colisiones. Como resultado de una colisión los vectores de velocidad cambian de $\mathbf{v}, \mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}', \mathbf{v}_1'$ disminuyendo la densidad de fase $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, mientras que debido a la llamada colisión inversa en la que $\mathbf{v}', \mathbf{v}_1' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{v}_1$ incrementa la densidad de fase $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$. Tomando en cuenta la pérdida y la ganancia, podemos escribir

$$J(f, f) = J(f, f)_+ - J(f, f)_-$$

donde $J(f, f)_+ (J(f, f)_-)$ es la densidad numérica de las colisiones por unidad de tiempo que produce (destruye) un punto en la densidad de fase con velocidad \mathbf{v} .

Todas las partículas con velocidad \mathbf{v}_1 en el volumen $g dt b db d\epsilon$ mostrado en la figura 4.4, colisionarán con la partícula en el centro (velocidad \mathbf{v}) durante dt , así que, dicha partícula experimenta

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) d\mathbf{v}_1 g dt b db d\epsilon$$

de tales colisiones durante dt (donde las velocidades después de la colisión son $\mathbf{v}', \mathbf{v}_1'$). La densidad numérica de partículas con velocidad \mathbf{v} es $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$, entonces la densidad numérica de colisiones $\mathbf{v}, \mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}', \mathbf{v}_1'$ por unidad de tiempo es

$$J(f, f)_- d\mathbf{c} = \int \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) g \sigma \sin(\Theta) d(\Theta) d\epsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}. \quad (4.11)$$

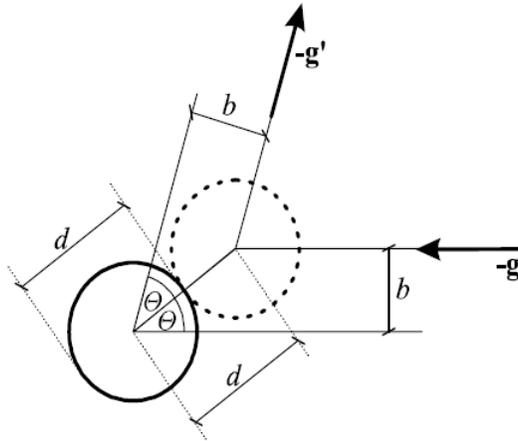


Figura 4.3: Colisión entre dos esferas duras de diámetro d [?].

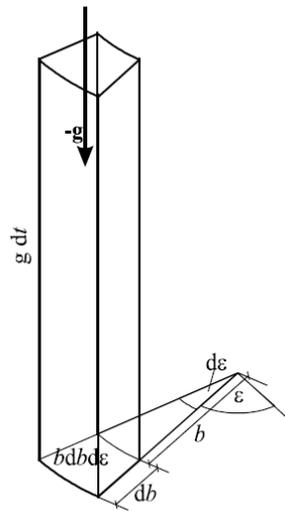


Figura 4.4: Contando las colisiones. [?]

En la expresión anterior se consideró que la sección transversal σ , es tal que $b db = \sigma \sin(\Theta) d\theta$, e integrando sobre todas las posibles parejas, es decir, sobre todas las velocidades \mathbf{v}_1 , todo el ángulo de colisión Θ , y todo el ángulo ε que describen la orientación del plano de colisión, ver figura 4.4.

Para considerar la colisión inversa \mathbf{v}' , $\mathbf{v}_1' \rightarrow \mathbf{v}$, \mathbf{v}_1 , se toman en cuenta los argumentos anteriores,

la densidad numérica de estas colisiones por unidad de tiempo es

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) g' \sigma' \sin(\Theta) d\Theta d\varepsilon d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}'$$

donde las velocidades se relacionan de acuerdo con las ecuaciones (4.9). Además $g'=g$, $b'=b$, que implica que $\Theta' = \Theta(b', g') = \Theta(b, g) = \Theta$, y por lo tanto $\sigma' = \sigma$, puede demostrarse que $d\mathbf{c} d\mathbf{c}_1 = d\mathbf{c} d\mathbf{c}'_1$. La suma de la densidad de colisiones que produce una partícula con velocidad \mathbf{v} es

$$J(f, f)_+ d\mathbf{v} = \int \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t) g \sigma \sin(\Theta) d\Theta d\varepsilon d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}. \quad (4.12)$$

Para simplificar la notación, escribimos

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = f \quad , \quad f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) = f_1 \quad , \quad f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) = f' \quad , \quad f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t) = f'_1,$$

finalmente obtenemos una expresión para $J(f, f)$, haciendo la resta de las partículas que salen (representadas por (4.11)) de las que entran (contabilizadas en (4.12)) al volumen considerado

$$J(f, f) = \int \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (f' f'_1 - f f_1) g \sigma \sin(\Theta) d\Theta d\varepsilon d\mathbf{v}'_1. \quad (4.13)$$

Si ahora igualamos los dos términos (4.2) y (4.13) que describen como cambia la función de distribución

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \int \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (f' f'_1 - f f_1) g \sigma \sin(\Theta) d\Theta d\varepsilon d\mathbf{v}'_1. \quad (4.14)$$

La ecuación de Boltzmann (4.14) es la ecuación central de la teoría cinética de gases. Es una ecuación integro-diferencial no lineal para la función de distribución f , que describe la evolución en el espacio y en el tiempo de un gas ideal monoatómico, que toma en cuenta su movimiento libre, la aceleración debida a fuerzas externas y las colisiones. Debido a su complejidad, la ecuación no puede resolverse fácilmente y en la mayoría de los casos se tienen que buscar soluciones numéricas.

Al término de la izquierda se le conoce como de término de deriva, mientras que a la integral de la derecha se le llama término de colisión, que suele escribirse en forma simplificada como $J(f, f)$, la ecuación entonces toma la siguiente forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = J(f, f), \quad (4.15)$$

en ocasiones la ecuación anterior se expresa en la siguiente forma general

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f - J(f, f) &= 0 \\ \xi(f) &= 0, \end{aligned} \quad (4.16)$$

donde $\xi(f)$ denota ciertas operaciones aplicadas sobre la desconocida función f .

La ecuación anterior plantea un problema de valores iniciales en el espacio μ , dada $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t = 0)$ la pregunta es ¿cómo se puede calcular $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ bajo ciertas condiciones de frontera?, problema no resuelto en general.

El teorema H planteado por Boltzmann [44], estudia que condiciones debe satisfacer $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ para

determinar el equilibrio termodinámico del sistema.

En un gas no homogéneo, caso más general, la condición de equilibrio local se tiene si $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ donde

$$H(t) \equiv \int \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \ln f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}d\mathbf{v}, \quad (4.17)$$

lo cual se cumple si $f'f_1' = ff_1$, la condición necesaria y suficiente para que H sea un mínimo es que $\ln f' + \ln f_1' = \ln f + \ln f_1$, las únicas cantidades que son iguales antes y después de la colisión son los invariantes colisionales: m , $m\mathbf{v}$ y $\frac{1}{2}mv^2$, entonces, la función de distribución del equilibrio, denotada por $f^{(0)}$ una combinación lineal de dichas cantidades. A esta función se le asocia el concepto de equilibrio local, porque se introduce en forma arbitraria en su estructura los valores de las variables hidrodinámicas $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ y $e(\mathbf{r}, t)$. Para incluir el concepto de temperatura, se procede como lo hizo Maxwell, en este modelo cinético las moléculas tienen 3 grados de libertad traslacionales, entonces $E_{cinética} = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$. Por el teorema de equipartición de la energía, la energía cinética promedio es $\langle E_{cinética} \rangle = \frac{3}{2}k_B T$, si la energía interna por molécula es la energía cinética promedio, entonces podemos escribir la distribución maxwelliana local en términos de las variables locales n, \mathbf{u}, e [44] de la siguiente manera

$$f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = n(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m}{2\pi k_B T(\mathbf{r}, t)} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{m}{k_B T(\mathbf{r}, t)} [\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)]^2 \right\}, \quad (4.18)$$

esta función satisface $J(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0$, no toda la ecuación de Boltzmann, para conocer la solución completa es necesario calcular el término inhomogéneo

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right\} f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0,$$

si $\mathbf{F} = -\nabla V$, donde V es la energía potencial externa independiente del tiempo, se puede obtener la distribución de Maxwell-Boltzmann para el equilibrio termodinámico

$$f^{(eq)}(v) = n \left(\frac{1}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ -\frac{m}{k_B T} \left[\frac{1}{2}mv^2 + V(r) \right] \right\} \quad (4.19)$$

con $n = n^{(eq)} = \frac{n}{V}$ y $T = T^{(eq)}$. El sistema siempre alcanza un estado de equilibrio termodinámico (total) descrito por una función de distribución de Maxwell-Boltzmann [44].

4.2. Ecuación de Boltzmann para partículas auto-propulsadas (SPPBE)

El estudio de partículas auto-propulsadas (self-propelled) o auto-impulsadas (self-driven) tiene un par de décadas. La descripción cinética surge con el modelo de Grégoire y colaboradores [1], en el presente trabajo utilizamos este modelo, las consideraciones que lo forman:

- El sistema está formado por un conjunto de N bacterias que se mueven en un plano (2D), consideradas como partículas puntuales de masa $m = 1$ que se encuentran encerradas en una área.

- Cada partícula es caracterizada por su posición \mathbf{r} y velocidad \mathbf{v} , de tal manera que todas se pueden representar como N puntos en el espacio (\mathbf{r}, \mathbf{v}) .
- Se considera que las partículas se mueven con velocidad $\mathbf{v} = v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)$, donde v_0 es constante, $\hat{\mathbf{e}}(\theta)$ es un vector unitario en la dirección θ . El ángulo θ es el formado con la orientación promedio de las bacterias al moverse colectivamente $\bar{\theta}$. El espacio fase lo describen \mathbf{r} y θ . Esquemas de vectores y diagrama fase.
- Se supone que no existe ninguna fuerza externa actuando sobre las bacterias.
- $f(\mathbf{r}, \theta, t)$ representa la forma en que están distribuidas las posiciones y orientaciones de las partículas en el sistema. Ésta se utiliza para obtener las propiedades macroscópicas que caracterizan al sistema.
- Las partículas se mueven sin cambiar su dirección de movimiento (comportamiento balístico), hasta que experimentan un evento de auto-difusión o una colisión binaria que tienden a alinear las direcciones de las dos partículas.
- Las bacterias no se encuentran aisladas, sino que se encuentran inmersas en algún medio (agua, aire, etc.), para representarlo se introduce el parámetro η , que es una variable aleatoria caracterizada por una función de distribución gaussiana $p_0(\eta)$ y delta correlacionada (ruido blanco) con varianza σ_0^2 . El medio funciona como un reservorio, que altera el momento lineal y la energía de las bacterias, pero la forma en la que lo hace no se especifica.

El cambio de la función de distribución a medida que pasa el tiempo, se puede expresar mediante su derivada total de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \frac{Df}{Dt} &= \frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial \mathbf{r}} \\ &= \frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (4.20)$$

La expresión anterior es el **término de arrastre de la ecuación tipo Boltzmann para partículas auto-propulsadas**, llamado así porque resulta del arrastre de partículas debido al movimiento de una de las partículas.

El término de interacción de la ecuación de Boltzmann, es un balance de partículas que entran y salen del elemento $d\mathbf{r}d\theta$ por las siguientes situaciones:

Auto-difusión Las bacterias peritricas tienen periodos de movimiento angular aleatorio (viraje o cabeceo) después de los cuales, se mueven en cierta dirección casi recta, así se desplazan o difunden (sección 2.3). Cualquier partícula que tenga velocidad en la dirección θ , tiene la probabilidad por unidad de tiempo (λ) de cambiar la dirección de su velocidad a la dirección $\theta' = \theta + \eta$, entonces, λ mide la tasa del proceso, entrada y salida de partículas por auto-difusión. Hemos considerado $\lambda = \text{constante}$ como el caso más simple. El cambio en el número de partículas en el elemento de volumen $d\mathbf{r}d\theta$ debido a la auto-difusión, está formado por dos términos, el primero toma en cuenta la disminución (pérdida) de partículas en $d\mathbf{r}d\theta$, porque cambian la dirección de su velocidad a θ' ; el segundo de los términos, es el aumento (ganancia)

de partículas en $d\mathbf{r}d\theta$, resultado de la influencia que ejerce el medio sobre las partículas cuando se mueven en forma aleatoria.

$$I_{Auto-Difusión} = -\lambda f(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_o(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta', t), \quad (4.21)$$

La siguiente figura muestra la auto-difusión influida por el medio (ruido η)

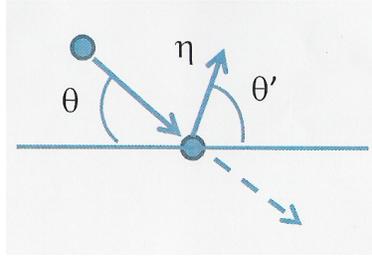


Figura 4.5: Auto-Difusión bacterial.

Colisión La colisión se considera elástica y solo entre pares de partículas (sistema diluido), cuando las partículas se acercan a una distancia d_0 , que es la distancia entre los centros de las partículas o el diámetro de las partículas.

La dirección de las velocidades de dos partículas antes de colisionar son θ_1 y θ_2 , después del encuentro sus direcciones son $\theta'_1 = \theta + \eta_1$ y $\theta'_2 = \bar{\theta} + \eta_2$, donde $\bar{\theta} = Arg(\theta_1 + \theta_2)$.

Como un caso particular, se podría considerar a los ruidos $\eta = \eta_1 = \eta_2$, pero en general, los eventos auto-difusión (η) y colisión (η_1, η_2) tienen distintas características (escala, tiempos, etc), por lo tanto el medio puede afectar de manera distinta a cada evento. Cada uno de los ruidos se consideran blancos y gaussianos, con distribución $p(\eta)$ y varianza σ^2 .

$$\begin{aligned} I_{Colisión} = & -f(\mathbf{r}, \theta, t) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' v_0 |\mathbf{e}(\theta') - \mathbf{e}(\theta)| (4d_0^2) f(\mathbf{r}, \theta', t) \\ & + \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) v_0 |\mathbf{e}(\theta_2) - \mathbf{e}(\theta_1)| \\ & \times (4d_0^2) \delta(\bar{\theta} + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta_1, t) f(\mathbf{r}, \theta_2, t) \end{aligned} \quad (4.22)$$

Como resultado de la colisión de dos partículas, éstas cambian sus orientaciones y posiciones abandonando el elemento $d\mathbf{r}d\theta$, el primero de los términos representa esta disminución de partículas. El segundo de los términos representa el aumento de partículas que llegan al elemento $d\mathbf{r}d\theta$, como resultado del choque de pares de partículas, pero cuya colisión se ve afectada por el ruido del medio, se trata de la colisión inversa, y como las dos partículas que intervendrán en la colisión vienen del medio, éste influye. La figura de abajo muestra las direcciones antes y después de la colisión

Este modelo describe el movimiento de partículas auto-propulsadas por medio de una ecuación (SPPBE) (4.23) ó (4.24) que tiene la estructura de la ecuación que Boltzmann propuso para describir a los gases. Ecuación que resulta de igualar la expresión 4.20

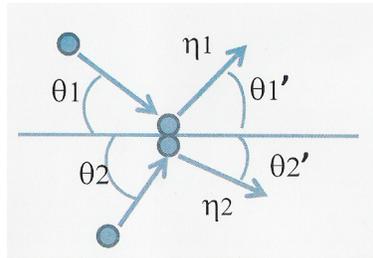


Figura 4.6: Colisión entre dos bacteria.

a la suma de los términos de auto-difusión (expresión (4.21)) y el término de colisión (expresión (4.22)).

$$\frac{Df}{Dt} = I_{Auto-Difusión} + I_{Colisión} \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial \mathbf{r}} = I_{Auto-Difusión} + I_{Colisión}. \quad (4.24)$$

5

Solución de la ecuación SPPBE.

En este capítulo se demuestra que la función que depende de la densidad uniforme mencionada por Grégoire y colaboradores en [1] es solución de la ecuación SPPEB (segunda sección), también se demuestra una solución más general que depende de la densidad local (primera sección).

La ecuación SPPBE (4.24) es

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial \mathbf{r}} = I_{Auto-Dif}[f(\mathbf{r}, \theta, t)] + I_{Col}[f(\mathbf{r}, \theta, t)],$$

donde los términos de auto-difusión y colisión son

$$\begin{aligned} I_{Auto-Dif} &= - \lambda f(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta', t) \\ I_{Col} &= - f(\mathbf{r}, \theta, t) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' v_0 |\hat{\mathbf{e}}(\theta') - \hat{\mathbf{e}}(\theta)| (4d_0^2) f(\mathbf{r}, \theta', t) \\ &+ \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) v_0 |\hat{\mathbf{e}}(\theta_2) - \hat{\mathbf{e}}(\theta_1)| (4d_0^2) \delta(\bar{\theta} + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta_1, t) f(\mathbf{r}, \theta_2, t). \end{aligned}$$

5.1. En términos de la densidad local

Si la función de distribución depende de la densidad local

$$f(\mathbf{r}, \theta, t) = \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi}, \quad (5.1)$$

al sustituirla en el término de arrastre se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial \mathbf{r}} &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} \right] + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{2\pi} \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}}. \end{aligned}$$

Por otra parte, las integrales $I_{Auto-Dif}$ y I_{Col} se realizan en las variables η , θ_1 , θ_2 , así que al sustituir $\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi}$, este cociente no interviene en las integrales, resultando

$$I_{Auto-Dif} + I_{Col} = -\lambda \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} + \lambda \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} I_1 - \left[\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} \right]^2 I_2 + \left[\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} \right]^2 I_3, \quad (5.2)$$

donde las integrales son

$$I_1 = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta), \quad (5.3)$$

$$I_2 = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' v_0 |\mathbf{e}(\theta') - \mathbf{e}(\theta)| (4d_0^2), \quad (5.4)$$

$$I_3 = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) v_0 |\mathbf{e}(\theta') - \mathbf{e}(\theta)| (4d_0^2) \delta(\bar{\theta} + \eta - \theta). \quad (5.5)$$

En I_1 : hacemos primero la integral con respecto a θ' y después con respecto a η resultando

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \delta[\theta' - (\theta - \eta)], \quad \text{si } -\pi \leq \theta - \eta \leq \pi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left(\frac{-\eta^2}{2\sigma_0^2}\right) = 1 \end{aligned}$$

donde hemos utilizado una de las propiedades de la función δ y que $p_0(\eta)$ es una distribución gaussiana normalizada.

En el caso de I_3 : calculamos el ángulo promedio definido en el modelo

$$\bar{\theta} = \arg(e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}) = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2},$$

el término $|\mathbf{e}(\theta') - \mathbf{e}(\theta)|$ se puede escribir desarrollando el producto escalar

$$\begin{aligned} |\mathbf{e}(\theta_2) - \mathbf{e}(\theta_1)| &= \sqrt{[\mathbf{e}(\theta_2) - \mathbf{e}(\theta_1)] \cdot [\mathbf{e}(\theta_2) - \mathbf{e}(\theta_1)]} \\ &= \sqrt{\mathbf{e}(\theta_2) \cdot \mathbf{e}(\theta_2) - \mathbf{e}(\theta_2) \cdot \mathbf{e}(\theta_1) - \mathbf{e}(\theta_1) \cdot \mathbf{e}(\theta_2) + \mathbf{e}(\theta_1) \cdot \mathbf{e}(\theta_1)} \\ &= \sqrt{2} \sqrt{1 - \mathbf{e}(\theta_2) \cdot \mathbf{e}(\theta_1)}, \end{aligned}$$

si definimos las variables

$$\alpha = \theta_2 - \theta_1, \quad \Theta = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \quad (5.6)$$

entonces

$$\mathbf{e}(\theta_2) \cdot \mathbf{e}(\theta_1) = |\mathbf{e}(\theta_2)| |\mathbf{e}(\theta_1)| \cos(\theta) = \cos(\alpha), \quad (5.7)$$

ya que, por definición del producto escalar θ es el ángulo entre los dos vectores unitarios en las direcciones θ_1 y θ_2 , entonces θ es igual α . El producto $d\theta_1 d\theta_2 = J d\Theta d\alpha$, donde J el Jacobiano de la Transformación $\{\theta_1, \theta_2\} \rightarrow \{\Theta, \alpha\}$, expresada por las ecuaciones (5.6)

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial \Theta}{\partial \theta_1} & \frac{\partial \alpha}{\partial \theta_1} \\ \frac{\partial \Theta}{\partial \theta_2} & \frac{\partial \alpha}{\partial \theta_2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & -1 \\ \frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix} = 1,$$

tomando en cuenta los límites de integración $\theta_1 = -\pi = \theta_2 \Rightarrow \Theta = -\pi$ y $\theta_1 = \pi = \theta_2 \Rightarrow \Theta = \pi$, I_3 se obtiene

$$\begin{aligned} I_3 &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) v_0 |\mathbf{e}(\theta') - \mathbf{e}(\theta)| (4d_0^2) \delta(\bar{\theta} + \eta - \theta) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\Theta \int d\alpha \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) v_0 \sqrt{2} \sqrt{1 - \cos(\alpha)} (4d_0^2) \delta(\Theta + \eta - \theta), \end{aligned}$$

con este cambio de variables ahora se puede realizar la integración sobre Θ

$$\begin{aligned} I_3 &= v_0 (4d_0^2) \int d\alpha \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) \sqrt{2} \sqrt{1 - \cos(\alpha)} \int_{-\pi}^{\pi} d\Theta \delta[\Theta - (\theta - \eta)] \\ &= v_0 (4d_0^2) \int d\alpha \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) \sqrt{2} \sqrt{1 - \cos(\alpha)}, \quad \text{si } -\pi \leq (\theta - \eta) \leq \pi \end{aligned}$$

donde se ha utilizado una propiedad de la función δ , integrando con respecto a η

$$\begin{aligned} I_3 &= v_0 (4d_0^2) \int d\alpha \sqrt{2} \sqrt{1 - \cos(\alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) \\ &= v_0 (4d_0^2) \int d\alpha \sqrt{2} \sqrt{1 - \cos(\alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(\frac{-\eta^2}{2\sigma}\right) \\ &= v_0 (4d_0^2) \int d\alpha \sqrt{2} \sqrt{1 - \cos(\alpha)}, \end{aligned}$$

$\alpha = \theta_2 - \theta_1$, si se fija, por ejemplo $\theta_1 = \theta$, y consideramos θ_2 como la variable de integración, ésta es una variable muda, así que se le puede asociar cualquier variable, en particular $\theta_2 = \theta'$, entonces $d\alpha = d\theta_2 = d\theta'$, entonces

$$|\mathbf{e}(\theta_2) - \mathbf{e}(\theta_1)| = \sqrt{2} \sqrt{1 - \mathbf{e}(\theta_2) \cdot \mathbf{e}(\theta_1)} = |\mathbf{e}(\theta') - \mathbf{e}(\theta)|$$

I_3 se transforma en

$$I_3 = v_0 (4d_0^2) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' |\mathbf{e}(\theta') - \mathbf{e}(\theta)| = I_2$$

que es la integral que se había identificado como I_2 .

Sustituyendo en la ecuación (5.2) los resultados de las tres integrales I_1 e I_3

$$I_{dif} + I_{col} = -\lambda \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} + \lambda \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} - \left[\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} \right]^2 I_2 + \left[\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi} \right]^2 I_2 \quad (5.8)$$

$$= 0, \quad (5.9)$$

obtenermos que el término de interacción de la ecuación de Boltzmann se anula.

Igualando ambos resultados

$$\frac{1}{2\pi} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{2\pi} \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad (5.10)$$

entonces, la función de distribución (5.1) es solución de la ecuación de Boltzmann, si

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \rho(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (5.11)$$

podemos concluir que en un sistema de referencia que se mueva con velocidad \mathbf{v} , junto con las partículas, la densidad local $\rho(\mathbf{r}, t)$ es constante.

5.2. En función de la densidad uniforme.

En el caso de que la función de distribución dependa de la densidad uniforme (constante)

$$f(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho}{2\pi}, \quad (5.12)$$

al sustituirla en el término de arrastre se obtiene

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho}{2\pi} \right) + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\rho}{2\pi} \right) = 0.$$

El término de interacción de la sección anterior no se altera, pues en este caso tampoco la función de distribución participa en las integrales, entonces también se anula

$$I_{dif} + I_{col} = -\lambda \frac{\rho}{2\pi} + \lambda \frac{\rho}{2\pi} (1) - \left[\frac{\rho}{2\pi} \right]^2 I_2 + \left[\frac{\rho}{2\pi} \right]^2 I_2 = 0. \quad (5.13)$$

La función de distribución con densidad uniforme es solución trivial de la ecuación de Boltzmann (4.24).

6

Ecuaciones hidrodinámicas.

En la primera sección se obtiene la ecuación de transporte de Maxwell-Enskog, ecuación general de evolución temporal de variables dinámicas locales (promedio $\bar{\psi}$) en gases, que es consistente con la ecuación de Boltzmann [44]. En la segunda sección se desarrolla el cálculo para bacterias.

6.1. Gases simples

El promedio local de la variable dinámica $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ se define como

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int \psi(\mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad (6.1)$$

Al multiplicar la ecuación de Boltzmann (4.15) por $\psi(\mathbf{v})$ e integrar con respecto a \mathbf{v} , se obtiene

$$\int \psi(\mathbf{r}, t) \left\{ \frac{Df}{Dt} \right\} d\mathbf{v} = \int \psi(\mathbf{v}) J(f, f) d\mathbf{v} \equiv \Delta\psi(\mathbf{v}), \quad (6.2)$$

en el caso de que no exista fuerza externa ($\mathbf{F} = 0$) actuando sobre las partículas, el término de la izquierda es

$$\int \psi(\mathbf{v}) \left\{ \frac{Df}{Dt} \right\} d\mathbf{v} = \int \left[\psi(\mathbf{v}) \frac{\partial f}{\partial t} + \psi(\mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \nabla_r f \right] d\mathbf{v}, \quad (6.3)$$

los términos del lado izquierdo de (6.2) son

$$\begin{aligned} \int \psi(\mathbf{v}) \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} &= \frac{\partial}{\partial t} \int \psi(\mathbf{v}) f d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} n \overline{\psi(\mathbf{v})} \\ \int \psi(\mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \nabla_r f d\mathbf{v} &= \nabla_r \cdot \int \psi(\mathbf{v}) \mathbf{v} f d\mathbf{v} = \nabla_r \cdot (n \overline{\mathbf{v} \psi(\mathbf{v})}) \end{aligned}$$

donde se ha utilizado

$$\nabla_{\mathbf{r}}(\mathbf{v} f) = \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + f \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f, \quad (6.4)$$

sustituyendo el término de colisión de (4.14) el término del lado derecho de (6.2) es

$$\begin{aligned} \Delta \psi(\mathbf{v}) &= \int \psi(\mathbf{v}) J(f, f) d\mathbf{v} = \int \int \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \psi(\mathbf{v}) (f' f'_1 - f f_1) g \sigma \sin(\Theta) d\Theta d\varepsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v} \\ &= \frac{1}{4} \int \int \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \{\psi(\mathbf{v}) + \psi(\mathbf{v}_1) - \psi(\mathbf{v}') - \psi(\mathbf{v}'_1)\} (f' f'_1 - f f_1) g \sigma \sin(\Theta) d\Theta d\varepsilon d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v} \end{aligned} \quad (6.5)$$

resultando

$$\frac{\partial}{\partial t}(n \overline{\psi(v)}) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n) \quad (6.6)$$

como \mathbf{r} y \mathbf{v} son independientes $\Rightarrow \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} = 0$, además si ψ no depende de $\mathbf{r} \Rightarrow \nabla_{\mathbf{r}} \psi = 0$, despejando

$$\psi \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\psi \mathbf{v} f),$$

sustituyendo el término anterior en (6.3) resulta

$$\int \left[\psi(\mathbf{v}) \frac{\partial f}{\partial t} + \psi(\mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f \right] d\mathbf{v} = \int \left[\frac{\partial}{\partial t}(\psi f) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\psi \mathbf{v} f) \right],$$

como la integral y las derivadas son en diferentes variables, \mathbf{v} , t , y \mathbf{r} , se puede intercambiar su orden

$$\int \frac{\partial}{\partial t}(\psi f) d\mathbf{v} + \int \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\psi \mathbf{v} f) d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \int (\psi f) d\mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int (\psi \mathbf{v} f) d\mathbf{v}$$

de acuerdo con la definición del promedio local, ecuación (6.1) se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \int (\psi f) d\mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int (\psi \mathbf{v} f) d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t}(n \overline{\psi}) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n \overline{\psi \mathbf{v}}),$$

al igualar la expresión anterior al término del lado derecho de la ecuación (6.2) resulta

$$\frac{\partial}{\partial t}(n \overline{\psi}) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n \overline{\psi \mathbf{v}}) = \int \psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) J(f, f) d\mathbf{v}, \quad (6.7)$$

Ecuación de transporte de Maxwell-Enskog que describe la evolución temporal de $\overline{\psi}$ en el espacio de configuración (espacio). A partir de ella se pueden obtener las ecuaciones de conservación de masa (ecuación de continuidad) e ímpetu y la ecuación de balance de energía interna. Esto demuestra que las ecuaciones de conservación son una consecuencia directa de la ecuación de Boltzmann, con la enorme ventaja de que las dos corrientes (asociadas con el transporte del ímpetu y el flujo de energía interna caótica) introducidas en ellas, pueden en principio calcularse si se resuelven las integrales de las que dependen. Por lo tanto, la teoría cinética a través del modelo de Boltzmann, puede generar resultados importantes que son ajenos a la descripción macroscópica [44].

6.2. Bacterias

A continuación se obtienen las ecuaciones macroscópicas para bacterias, a partir de la ecuación SPPBE (4.24)

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \theta, t) = I_{Auto-Dif} + I_{Col},$$

con las integrales (4.21) y (4.22)

$$\begin{aligned} I_{Auto-Dif} &= -\lambda f(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta', t), \\ I_{Col} &= -f(\mathbf{r}, \theta, t) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' v_0 |\hat{\mathbf{e}}(\theta') - \hat{\mathbf{e}}(\theta)| (4d_0^2) f(\mathbf{r}, \theta', t) \\ &\quad + \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) v_0 |\hat{\mathbf{e}}(\theta_2) - \hat{\mathbf{e}}(\theta_1)| (4d_0^2) \delta(\bar{\theta} + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta_1, t) f(\mathbf{r}, \theta_2, t), \end{aligned}$$

donde se define la dirección de referencia $\bar{\theta}$ como

$$\bar{\theta} = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}. \quad (6.8)$$

La ecuación de transporte general para el caso de bacterias es

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (n \bar{\psi}) + \nabla_r \cdot (n \bar{\psi} \bar{\mathbf{v}}) &= \int \psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) [I_{Auto-Dif} + I_{Auto-Dif}] d\mathbf{v} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) [I_{Auto-Dif} + I_{Auto-Dif}] d\theta, \end{aligned} \quad (6.9)$$

donde la velocidad \mathbf{v} tiene magnitud constante v_0 y dirección $\hat{\mathbf{e}}(\theta)$, por lo que las integrales en la velocidad se realizarán en la variable θ de $-\pi$ a π .

Utilizando esta expresión se demostrará que la masa ($\psi = m$) es un invariante colisional microscópico que satisface la ecuación de conservación de la densidad (continuidad) a nivel macroscópico, en el caso del momento lineal ($\psi = m\mathbf{v}$) se obtiene una ecuación de balance resultado de que esta cantidad no es invariante colisional.

6.2.1. Ecuación de Continuidad.

La ecuación (6.9) en el caso

$$\psi = m = 1 \Rightarrow \bar{\psi} = 1 \Rightarrow \bar{\psi} \bar{\mathbf{v}} = \bar{m} \bar{\mathbf{v}} = \bar{\mathbf{v}}$$

resulta ser

$$\frac{\partial}{\partial t} (n) + \nabla_r \cdot (n \bar{\mathbf{v}}) = \int [I_{Auto-Dif} + I_{Col}] d\theta. \quad (6.10)$$

Definimos las siguientes variables locales

Densidad local es el número de partículas que al tiempo t se encuentran en \mathbf{r} independientemente de las direcciones de sus velocidades

$$\rho(\mathbf{r}, t) = m \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f(\mathbf{r}, \theta, t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f(\mathbf{r}, \theta, t) = n(\mathbf{r}, t), \quad (6.11)$$

Velocidad local es velocidad hidrodinámica del fluido, se define como el promedio de la velocidad molecular (individual) de las partículas, así que de acuerdo con la definición del promedio de variables dinámicas (6.1) es

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \bar{\mathbf{v}} = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \theta, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)} v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \hat{\mathbf{e}}(\theta) f(\mathbf{r}, \theta, t). \quad (6.12)$$

Entonces el lado izquierdo de la ecuación (6.10) es

$$\frac{\partial}{\partial t}(n m) + \nabla_r \cdot (n m \bar{\mathbf{v}}) = \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_r \cdot [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)], \quad (6.13)$$

el lado derecho de (6.10) esta formado de dos integrales, la primera es

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta I_{Auto-Dif} &= -\lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta', t) \\ &= -\lambda n(\mathbf{r}, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) f(\mathbf{r}, \theta', t) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \delta(\theta' + \eta - \theta), \end{aligned} \quad (6.14)$$

en el primer término se encuentra la densidad local y el resultado de la integral sobre θ es

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \delta(\theta' + \eta - \theta) = \Theta(\pi - \eta - \theta') \Theta(\pi + \eta + \theta') = 1, \quad \text{si } \pi \geq \eta + \theta'$$

entonces

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta I_{Auto-Dif} = -\lambda \rho(\mathbf{r}, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' f(\mathbf{r}, \theta', t) \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta),$$

como $p_0(\eta)$ es una distribución gaussiana normalizada $\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) = 1$, por lo tanto

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta I_{Auto-Dif} = -\lambda \rho(\mathbf{r}, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' f(\mathbf{r}, \theta', t)$$

la integral del lado derecho, es precisamente la densidad local si se considera que θ' es la variable de integración y por lo tanto una variable muda, si $\theta' = \theta$ se obtiene

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta I_{Auto-Dif} = -\lambda \rho(\mathbf{r}, t) + \lambda \rho(\mathbf{r}, t)$$

por lo tanto, la integral sobre θ del término de difusión se anula

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta I_{Auto-Dif} = 0, \quad (6.15)$$

si la integral del término de colisión es

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta I_{Col} = I_1 + I_2, \quad (6.16)$$

con I_1 e I_2 de la siguiente forma

$$I_1 = -(4d_0^2) v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f(\mathbf{r}, \theta, t) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' |\hat{\mathbf{e}}(\theta') - \hat{\mathbf{e}}(\theta)| f(\mathbf{r}, \theta', t) \quad (6.17)$$

$$I_2 = (4d_0^2) v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) |\hat{\mathbf{e}}(\theta_2) - \hat{\mathbf{e}}(\theta_1)| \delta(\bar{\theta} + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta_1, t) f(\mathbf{r}, \theta_2, t), \quad (6.18)$$

la integral en θ de I_2 es

$$I_2 = (4d_0^2) v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) |\hat{\mathbf{e}}(\theta_2) - \hat{\mathbf{e}}(\theta_1)| f(\mathbf{r}, \theta_1, t) f(\mathbf{r}, \theta_2, t) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \delta(\bar{\theta} + \eta - \theta),$$

$\bar{\theta}$ está dada por la ecuación (6.8), entonces

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \delta(\bar{\theta} + \eta - \theta) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \delta\left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} + \eta - \theta\right) = \Theta\left(\pi - \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} - \eta\right) \Theta\left(\pi + \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} + \eta\right) = 1, \\ \text{si } \pi \geq \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} + \eta$$

la integral resultante es

$$I_2 = (4d_0^2) v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 |\hat{\mathbf{e}}(\theta_2) - \hat{\mathbf{e}}(\theta_1)| f(\mathbf{r}, \theta_1, t) f(\mathbf{r}, \theta_2, t) \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta)$$

como $\int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) = 1$ la ecuación anterior se reduce a

$$I_2 = (4d_0^2) v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 |\hat{\mathbf{e}}(\theta_2) - \hat{\mathbf{e}}(\theta_1)| f(\mathbf{r}, \theta_1, t) f(\mathbf{r}, \theta_2, t) \quad (6.19)$$

la ecuación (6.19) es precisamente la integral (6.17) con signo opuesto, es decir, $I_2 = -I_1$, entonces (6.16) es

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta I_{Col} = -I_2 + I_2 = 0. \quad (6.20)$$

Al combinar (6.13) y (6.20) resulta

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)] = 0. \quad (6.21)$$

La ecuación anterior recibe el nombre de **Ecuación de Continuidad**. Representa la conservación de la densidad de bacterias (partículas) en el sistema biológico, pues no existe ninguna fuente que aumente (cree) la densidad de partículas, ni sumidero que disminuya (desaparezca) partículas, consecuencia de que el sistema es cerrado.

En gases, la ecuación de transporte general (6.31)

$$\frac{\partial}{\partial t}(n \bar{\psi}) + \nabla_r \cdot (n \bar{\psi} \bar{\mathbf{v}}) = \int \psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) J(f, f) d\mathbf{v},$$

en el caso

$$\begin{aligned} \psi = m &\Rightarrow \bar{\psi} = m \quad , \quad \bar{\psi} \bar{\mathbf{v}} = \overline{m \mathbf{v}} = m \bar{\mathbf{v}} \quad , \\ &\Rightarrow \int \psi(\mathbf{v}) J(f, f) d\mathbf{v} = m \int J(f, f) d\mathbf{v} = m \int \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (f' f'_1 - f f_1) g \sigma \text{sen}(\Theta) d\Theta d\varepsilon d\mathbf{v}_1 = 0, \end{aligned} \quad (6.22)$$

la última de las expresiones es la condición de que m es un invariante colisional, pues la masa de las partículas es la misma antes y después de la colisión, entonces el Kernel de colisión es $J(f, f) = 0$, así que se obtiene la ecuación de conservación

$$\frac{\partial}{\partial t}(nm) + \nabla_r \cdot (nm \bar{\mathbf{v}}) = 0,$$

como la densidad de masa es $\rho = nm$ y la velocidad hidrodinámica es el promedio de la velocidad molecular $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{v}}$ se obtiene

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_r \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0.$$

En ambos sistemas se cumple la ecuación de continuidad, por tratarse de sistemas cerrados. Ésta es la expresión local de la conservación de la masa de las bacterias a nivel microscópico durante las colisiones.

6.2.2. Ecuación de Balance del momento lineal.

Ahora la variable dinámica es el ímpetu molecular, al multiplicar la ecuación SSPEB por $\psi = m\mathbf{v} = v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)$, los términos de la ecuación de transporte para bacterias (6.9) se convierten en

$$\frac{\partial}{\partial t}[n \bar{\psi}] = \frac{\partial}{\partial t}[n \bar{\mathbf{v}}] = \frac{\partial}{\partial t}[n \mathbf{u}] = \frac{\partial}{\partial t}[\rho \mathbf{u}] \quad (6.23)$$

$$\nabla_r \cdot [n \bar{\psi} \bar{\mathbf{v}}] = \nabla_r \cdot [n \bar{\mathbf{v}} \bar{\mathbf{v}}] \quad (6.24)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \psi(\mathbf{v}) [I_{Auto-Dif} + I_{Auto-Dif}] &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta m \mathbf{v} [I_{Auto-Dif} + I_{Auto-Dif}] \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) [I_{Auto-Dif} + I_{Col}]. \end{aligned} \quad (6.25)$$

De acuerdo con la definición del promedio local (6.1) el término en (6.24) es

$$n \bar{\mathbf{v}} \bar{\mathbf{v}} = \frac{n}{n} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \equiv \underline{P}(\mathbf{r}, t), \quad (6.26)$$

definido como el tensor de Presión \underline{P} , que resulta del producto directo o tensorial del vector $\mathbf{v} = v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)$ con el mismo, que expresado en sus componentes es

$$v = v_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + v_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} = v_0 \cos(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + v_0 \text{sen}(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \quad (6.27)$$

y en forma matricial se escribe como

$$\mathbf{v}\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_{\bar{\theta}} \\ v_{\perp} \end{pmatrix} (v_{\bar{\theta}} \quad v_{\perp}) = \begin{pmatrix} v_{\bar{\theta}}v_{\bar{\theta}} & v_{\bar{\theta}}v_{\perp} \\ v_{\perp}v_{\bar{\theta}} & v_{\perp}v_{\perp} \end{pmatrix}$$

entonces \underline{P} es un tensor de segundo orden que puede expresarse como una matriz de 2×2

$$\mathbf{v}\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_0 \cos(\theta) \\ v_0 \sen(\theta) \end{pmatrix} (v_0 \cos(\theta) \quad v_0 \sen(\theta)) = v_0^2 \begin{pmatrix} \cos^2(\theta) & \cos(\theta)\sen(\theta) \\ \cos(\theta)\sen(\theta) & \sen^2(\theta) \end{pmatrix}, \quad (6.28)$$

la ecuación de transporte (6.9) que resulta de tomar en cuenta (6.23), (6.24), (6.26) es

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho \mathbf{u}] + \nabla_r \cdot \underline{P} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) [I_{Auto-Dif} + I_{Col}]. \quad (6.29)$$

Para simplificar el lado derecho de la expresión anterior, se toma en cuenta sólo el término de Auto-Difusión ($I_{Col} = 0$), entonces

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) [I_{Auto-Dif}] \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \left[-\lambda f(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta', t) \right], \\ &= -\lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) f(\mathbf{r}, \theta, t) \\ & \quad + v_0 \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \hat{\mathbf{e}}(\theta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta', t), \end{aligned}$$

el primer término contiene la velocidad promedio (ecuación (6.12)), entonces

$$\begin{aligned} v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \hat{\mathbf{e}}(\theta) [I_{Auto-Dif}] &= -\lambda \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \\ & \quad + \lambda v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \hat{\mathbf{e}}(\theta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta', t). \end{aligned}$$

Al sustituir la expresión anterior en (6.29)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)] + \nabla \cdot \underline{P}(\mathbf{r}, t) \\ &= -\lambda \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \lambda v_0 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \hat{\mathbf{e}}(\theta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f(\mathbf{r}, \theta', t), \end{aligned} \quad (6.30)$$

resultando la Ecuación de Balance del momento lineal, que representa el cambio total del momento en cierto volumen V al tiempo t . No hay conservación de la cantidad de movimiento, debido a que solo se consideran a las bacterias y el medio es representado por un ruido. Para un estudio más completo de los términos del lado derecho (fuentes y sumideros) falta agregar el término de colisión ($I_{colisión}$). El cambio de momento en el tiempo no es balanceado por su flujo y existe cambio neto de ímpetu en el volumen considerado.

Para gases, la ecuación de transporte general (6.31)

$$\frac{\partial}{\partial t}(n \bar{\psi}) + \nabla_r \cdot (n \bar{\psi \mathbf{v}}) = \int \psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) J(f, f) d\mathbf{v}, \quad (6.31)$$

para cuando $\psi = m\mathbf{v}$, el segundo miembro se anula por tratarse de un invariante colisional en gases y se obtiene la ecuación de conservación

$$\frac{\partial}{\partial t}(nm\bar{\mathbf{v}}) + \nabla \cdot (nm\bar{\mathbf{v}\mathbf{v}}) = 0,$$

como la densidad de masa es $\rho = nm$ y el tensor de presión 6.26 es

$$\bar{\mathbf{v}\mathbf{v}} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v}\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \theta, t) = \underline{P}$$

entonces

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \underline{P}) = 0.$$

La expresión anterior es la segunda ley de Newton para un fluido compuesto de partículas puntuales, que interaccionan a través de colisiones binarias, y sobre las cuales no actúa ninguna fuerza externa.

A diferencia del caso de gases, el momento lineal no es un invariante colisional para bacterias, como lo refleja la ecuación de balance (6.30) que contiene términos que pueden considerarse como sumideros y fuentes de ímpetu.

Energía La energía no se conserva!!

La energía que permite que las bacterias se muevan, la proporcionan los organismos, lo cual significa que para que exista movimiento en el sistema se necesita que se le proporcione la energía suficiente por medios externos!!!

7

Ecuaciones de movimiento para bacterias.

En este capítulo se aplica el Método de Chapman-Enskog para encontrar las ecuaciones de movimiento para bacterias, con la estructura de las ecuaciones de Euler y Navier-Stokes para fluidos ideales y viscosos, respectivamente. Este método consiste en proponer como solución de la ecuación de Boltzmann un desarrollo alrededor de la función de equilibrio local $f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Una posibilidad, era tomar como función de referencia las soluciones encontradas en el capítulo 5, la que depende de la densidad uniforme no proporciona información y la que contiene a la densidad local $f(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{2\pi}$ condujo a inconsistencias con las características del modelo. Para encontrar otra solución que funcionara en el Método de Chapman-Enskog, se utilizó el Método de Máxima Entropía.

7.1. Método de Máxima Entropía.

Para dar una descripción de sistemas en equilibrio, se puede utilizar lo que se conoce como teoría de información, que define cierta magnitud S llamada Entropía de información o Entropía Estadística, nombre que se le da por ser definida como la entropía de Shannon. La entropía de información cuantifica de alguna manera la información o la incertidumbre respecto de un sistema. El Método considera que un sistema alcanza el máximo compatible con las restricciones impuestas. El procedimiento habitual para maximizar la entropía consiste en recurrir al método variacional, imponiendo las restricciones mediante multiplicadores de Lagrange, uno por cada restricción. El método define una funcional que depende de la función a maximizar y de una combinación lineal de las restricciones, considerando los multiplicadores como coeficientes.

La aplicación del Método de Máxima Entropía permitirá obtener la función de distribución $f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t)$ que maximice la entropía y cumpla con las restricciones del sistema. Éstas definen las variables macroscópicas relevantes para el problema en términos de la función de distribución

La densidad de partículas en el caso de gases es

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv n(\mathbf{r}, t) m = m \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t),$$

cuando el sistema está formado de bacterias con $m = 1$ que se mueven con rapidez constante v_0 y cambian la dirección de su velocidad descrita θ

$$\Rightarrow \rho(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t). \quad (7.1)$$

La velocidad local o macroscópica del fluido para gases se define como

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \mathbf{v}, \quad (7.2)$$

en el caso de bacterias resulta

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) \mathbf{v} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta). \quad (7.3)$$

La entropía de información se define como

$$S(\mathbf{r}, t) \equiv - \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) \ln \left[\frac{f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \right], \quad (7.4)$$

la funcional a maximizar se define como

$$\mathbb{F}(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t) - \lambda(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t) - \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \quad (7.5)$$

λ y \mathbf{A} son multiplicadores de Lagrange que debemos determinar. Para establecer una $f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t)$ que dependa del tiempo en las variables macroscópicas del problema $f_{(l)}[\rho(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \theta]$ y que maximice la entropía de información podemos escribir la funcional tomando su dependencia en $f_{(l)}$, además, su derivada parcial debe ser cero

$$\mathbb{F}[f_{(l)}] = S[f_{(l)}] - \lambda(\mathbf{r}, t) \rho[f_{(l)}] - \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot (\rho \mathbf{u})[f_{(l)}], \quad \frac{\partial \mathbb{F}[f_{(l)}]}{\partial f_{(l)}} = 0$$

al sustituir las ecuaciones (7.1), (7.3) y (7.4) en la funcional (\mathbb{F}), y sin escribir explícitamente la dependencia de las funciones, la relación anterior toma la siguiente forma

$$\frac{\partial \mathbb{F}[f_{(l)}]}{\partial f_{(l)}} = \frac{\partial}{\partial f_{(l)}} \left[- \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f_{(l)} \ln \left(\frac{f_{(l)}}{\rho} \right) - \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f_{(l)} - \mathbf{A} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f_{(l)} v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \right] = 0,$$

cada integral es en la variable θ y en el mismo intervalo, entonces, se pueden agrupar en una sola integral

$$\frac{\partial}{\partial f_{(l)}} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \left[-f_{(l)} \ln \left(\frac{f_{(l)}}{\rho} \right) - \lambda f_{(l)} - \mathbf{A} \cdot f_{(l)} v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \right] = 0,$$

intercambiando el orden de aplicación de la derivada e integral, al calcular primero la derivada parcial con respecto a $f_{(l)}$ se obtiene

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \left[-\ln \left(\frac{f_{(l)}}{\rho} \right) - f_{(l)} \left(\frac{\rho}{f_{(l)}\rho} \right) - \lambda - \mathbf{A} \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \right] = 0,$$

para que la ecuación anterior se cumpla el integrando debe anularse, por lo tanto

$$\left[-\ln \left(\frac{f_{(l)}}{\rho} \right) - 1 - \lambda - \mathbf{A} \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \right] = 0.$$

Despejando $f_{(l)}$ y escribiendo la dependencia explícita de las funciones se obtiene

$$f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) = \rho(\mathbf{r}, t) e^{[-1-\lambda(\mathbf{r},t)-\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)]}. \quad (7.6)$$

Los multiplicadores de Lagrange λ y \mathbf{A} se deben obtener en términos de las variables macroscópicas del problema (ρ , \mathbf{u}), para eso se tiene que resolver el par de ecuaciones que resultan de sustituir la expresión anterior en las dos restricciones. Sustituyendo $f_{(l)}$ en la condición que cumple la densidad (7.1) resulta

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \rho(\mathbf{r}, t) e^{[-1-\lambda(\mathbf{r},t)-\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)]}$$

los términos que no dependen del ángulo θ pueden salir de la integral, entonces

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) e^{[-1-\lambda(\mathbf{r},t)]} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{[-\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)]}$$

que se reduce a

$$1 = e^{[-1-\lambda(\mathbf{r},t)]} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{[-\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)]} = \rho(\mathbf{r}, t) e^{[-1-\lambda(\mathbf{r},t)]} I, \quad (7.7)$$

donde

$$I = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{[-\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)]}. \quad (7.8)$$

Al sustituir $f_{(l)}$ en la restricción de la velocidad macroscópica (ecuación(7.3)) resulta

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \rho(\mathbf{r}, t) e^{[-1-\lambda(\mathbf{r},t)]} e^{[-\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)]} v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta),$$

que al escribir en términos de integral I es

$$\begin{aligned} \frac{\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} &= e^{[-1-\lambda(\mathbf{r},t)]} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{[-\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)]} v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \\ \Rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &= e^{-(1+\lambda)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \left[\int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-\mathbf{A} \cdot v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta)} \right] \\ &= e^{-(1+\lambda)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} [I] \end{aligned} \quad (7.9)$$

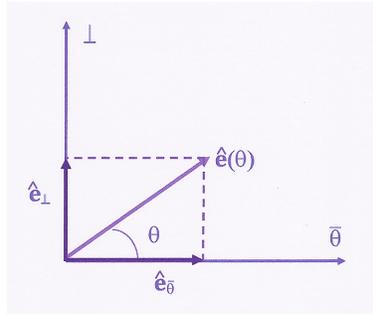


Figura 7.1: Componentes

Definimos un sistema de referencia $(q_{\bar{\theta}}, q_{\perp})$ con vectores unitarios $\hat{e}_{\bar{\theta}}$ y \hat{e}_{\perp} , respectivamente, nombre escogido con la finalidad de destacar que el eje de abscisas se considera en la dirección promedio de las partículas, mientras que el eje de ordenadas es la dirección perpendicular a la promedio, ver la figura 7.1. En este sistema los vectores $\hat{e}(\theta)$ y \mathbf{A} tienen las componentes

$$\hat{e}(\theta) = \cos(\theta) \hat{e}_{\bar{\theta}} + \sin(\theta) \hat{e}_{\perp} \quad , \quad \mathbf{A} = A[\cos(\alpha) \mathbf{e}_{\bar{\theta}} + \sin(\alpha) \mathbf{e}_{\perp}] \quad , \quad (7.10)$$

la integral es ahora

$$I = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{[-\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \cdot v_0 \hat{e}(\theta)]} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{\{-Av_0 [\cos(\alpha) \cos(\theta) + \sin(\alpha) \sin(\theta)]\}} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{[-Av_0 \cos(\alpha - \theta)]}$$

haciendo el cambio de variable $x = (\theta - \alpha)$, de donde $dx = d\theta$, los límites $\theta = \pi$ y $\theta = -\pi$ se convierten en $x_{sup} = \pi - \alpha$ y $x_{inf} = -\pi - \alpha$, respectivamente,

$$\Rightarrow I = \int_{-\pi - \alpha}^{\pi - \alpha} dx e^{[-Av_0 \cos(x)]} \quad , \quad (7.11)$$

la función exponencial se puede expresar con el siguiente desarrollo [53]

$$e^{[iz \cos(x)]} = J_0(z) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} i^k J_k(z) \cos(kx) \quad ,$$

donde la exponencial se expresa en términos de funciones de Bessel ($J_k(z)$) de primer tipo, orden k (k toma valores enteros reales) y la variable z es compleja. Para poder utilizar la expresión anterior es necesario identificar z , escribiendo explícitamente el argumento de la exponencial que queremos representar

$$e^{[-Av_0 \cos(x)]} = e^{[i(iAv_0) \cos(x)]} = e^{[iz \cos(x)]} \quad ,$$

entonces $z = iAv_0$ y por lo tanto

$$e^{[-Av_0 \cos(x)]} = J_0(z) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} i^k J_k(z) \cos(kx) \quad ,$$

sustituyendo en la integral (ecuación(7.11))

$$I = \int_{-\pi - \alpha}^{\pi - \alpha} dx \left[J_0(z) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (i)^k J_k(z) \cos(kx) \right] \quad ,$$

la primera integral es la diferencia de los límites y la segunda es

$$I = J_0(z)[\pi - \alpha + \pi + \alpha] + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (i)^k J_k(z) \int_{-\pi-\alpha}^{\pi-\alpha} dx \cos(kx),$$

haciendo el cambio de variable $y = kx$ donde $dx = \frac{dy}{k}$, los límites cambian a $y_{sup} = k(\pi - \alpha)$ y $y_{inf} = -k(\pi + \alpha)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_{-\pi-\alpha}^{\pi-\alpha} dx \cos(kx) &= \frac{1}{k} \int_{-k(\pi+\alpha)}^{k(\pi-\alpha)} dy \cos(y) = \frac{1}{k} \{\text{sen}[k(\pi - \alpha)] - \text{sen}[-k(\pi + \alpha)]\} \\ &= \frac{2}{k} \text{sen}(k\pi) \cos(k\alpha) = 0, \end{aligned}$$

entonces

$$I = 2\pi J_0(z) = 2\pi J_0(iAv_0)$$

utilizando la relación entre las funciones de Bessel de primer tipo $J_k(z)$ y de segundo tipo $I_k(w)$ para el orden $k = 0$ [53], donde $z = iw$ y $w = Av_0$,

$$i^{-k} J_k(iw) = I_k(w)$$

$$J_0(z) = J_0(iw) = I_0(w),$$

$$\Rightarrow I = 2\pi J_0(iAv_0) = 2\pi I_0(Av_0). \quad (7.12)$$

Al sustituir I en la restricción sobre la densidad (ecuación(7.7)) resulta

$$\begin{aligned} 1 = e^{(-1-\lambda)} I &= e^{(-1-\lambda)} 2\pi I_0(Av_0) \Rightarrow e^{(-1-\lambda)} = \frac{1}{2\pi I_0(Av_0)} \\ \Rightarrow \lambda &= \ln[2\pi I_0(Av_0)] - 1, \end{aligned} \quad (7.13)$$

para que el logaritmo natural esté bien definido su argumento debe ser positivo, la figura 7.2 lo muestra.

Para obtener una relación sencilla entre los multiplicadores (7.13), se grafica λ en un intervalo cercano a la unidad $0.9 \leq Av_0 \leq 1.1$ como lo muestra la figura 7.3. El producto adimensional Av_0 se considera cercano a la unidad porque A es el inverso de la velocidad del cúmulo de bacterias que se desplazan con una rapidez muy parecida a la velocidad individual v_0 . Entonces

$$\lambda \approx c_1 Av_0 + c_2 \quad (7.14)$$

el valor de las constantes se encuentra en el Apéndice de constantes (cuadro 9.1).

Al sustituir I (ecuación (7.12)) en la expresión (7.9) se tiene

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= e^{-(1+\lambda)} \left(\hat{\mathbf{A}} \frac{\partial}{\partial A} + \hat{\alpha} \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) [2\pi I_0(Av_0)] \\ &= \hat{\mathbf{A}} e^{-(1+\lambda)} 2\pi \frac{d}{dA} [I_0(Av_0)] \\ &= \hat{\mathbf{A}} e^{-(1+\lambda)} 2\pi v_0 I_1(Av_0) \end{aligned} \quad (7.15)$$

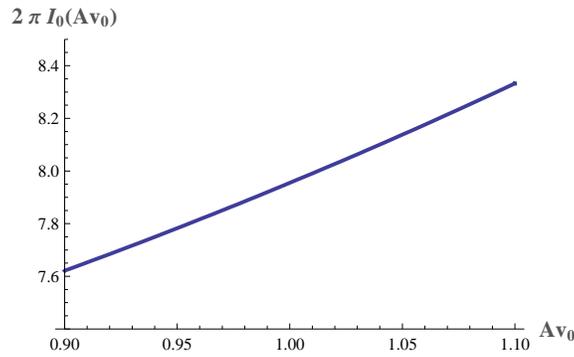
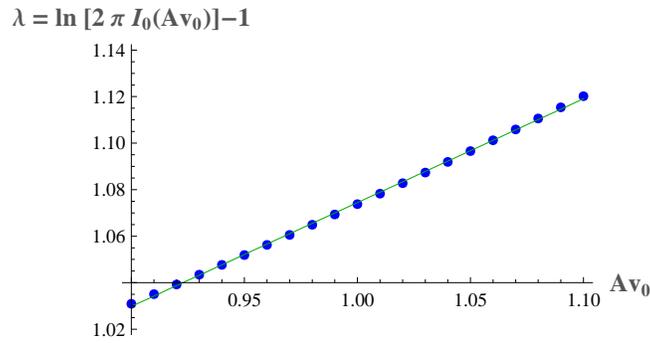


Figura 7.2: Argumento de función logaritmo natural.

Figura 7.3: λ (puntos) y su ajuste lineal (línea continua).

donde se ha ocupado el gradiente en coordenadas polares $\{A, \alpha\}$ y la propiedad de las funciones de Bessel [53]

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}} \frac{\partial \phi}{\partial A} + \hat{\alpha} \frac{1}{A} \frac{\partial \phi}{\partial \alpha}, \quad \frac{dI_0(Av_0)}{dA} = v_0 I_1(Av_0), \quad (7.16)$$

como el vector \mathbf{A} (7.10) es

$$\mathbf{A} = A[\cos(\alpha) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \sin(\alpha) \hat{\mathbf{e}}_{\perp}] \Rightarrow \hat{\mathbf{A}} = \frac{\mathbf{A}}{|\mathbf{A}|} = [\cos(\alpha) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \sin(\alpha) \hat{\mathbf{e}}_{\perp}] \approx \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}},$$

resultado de que el ángulo α es muy pequeño, entonces

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{A}} e^{-(1+\lambda)} 2\pi v_0 I_1(Av_0) = \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} e^{-(1+\lambda)} 2\pi v_0 I_1(Av_0) = \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} v_0 e^{-(1+c_1 Av_0+c_2)} 2\pi I_1(Av_0), \quad (7.17)$$

donde se ha sustituido λ simplificada (7.14). La función adimensional $e^{-(1+c_1 Av_0+c_2)} 2\pi I_1(Av_0)$ tiene comportamiento lineal en un intervalo muy cercano a $Av_0 = 1$ (figura 7.4), entonces la aproximamos por una recta, los valores de las constantes se encuentran en el primer Apéndice (cuadro 9.1).

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \approx \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} v_0 [c_3 v_0 A + c_4] \Rightarrow u_{\bar{\theta}} = v_0 [c_3 v_0 A + c_4], \quad (7.18)$$

Para obtener los multiplicadores de Lagrange locales despejamos $v_0 A$ en términos de $u_{\bar{\theta}}$ de la

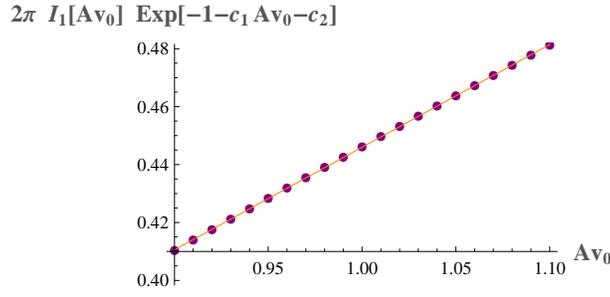


Figura 7.4: Ajuste lineal de función (representada por puntos) en velocidad local.

expresión anterior y sustituimos en λ

$$v_0 A(\mathbf{r}, t) = A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \quad (7.19)$$

$$\lambda(\mathbf{r}, t) = B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + B_2, \quad (7.20)$$

despejando de (7.19) se obtiene el cociente

$$\frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} = \frac{v_0 A - A_2}{A_1}, \quad (7.21)$$

las constantes c_3 , c_4 , A_1 , A_2 , B_1 y B_2 están reportadas en el cuadro 9.1.

Sustituyendo (7.19) y (7.20) en la expresión (7.6) se obtiene la función de distribución que maximiza la entropía

$$\begin{aligned} f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) &= \rho(\mathbf{r}, t) e^{\{-1 - \lambda(\mathbf{r}, t) - v_0 A(\mathbf{r}, t) [\cos(\alpha) \cos(\theta) + \sin(\alpha) \sin(\theta)]\}} \\ &= \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left\{-1 - B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - B_2 - \left[A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2\right] [\cos(\alpha) \cos(\theta) + \sin(\alpha) \sin(\theta)]\right\}} \\ &= D \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left\{-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left[A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2\right] [\cos(\alpha) \cos(\theta) + \sin(\alpha) \sin(\theta)]\right\}}, \end{aligned} \quad (7.22)$$

el valor de la constante $D = e^{-1-B_2}$ está en el cuadro 9.1. Las constantes que provienen de los cálculos son adimensionales.

El movimiento colectivo que describen las partículas es muy parecido al que describe una sola partícula, entonces el ángulo α que mide la desviación de la dirección promedio es un ángulo pequeño, así que podemos desarrollar en series de potencias cada una de las funciones seno y coseno de dicho ángulo

$$\begin{aligned} \sin(\alpha) &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{2k+1} \frac{\alpha^{2k+1}}{(2k+1)!} = \alpha + \frac{\alpha^3}{3!} - \frac{\alpha^5}{5!} + \dots \\ \cos(\alpha) &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{2k} \frac{\alpha^{2k}}{(2k)!} = 1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} + \dots, \end{aligned}$$

para un ángulo $\alpha = 5^\circ = 0.01745\text{rad}$, $\text{sen}(\alpha) \approx \alpha$ con un error de aproximación 1.1×10^{-4} y $\text{cos}(\alpha) \approx 1$ con 3.8×10^{-3} de error, con estas aproximaciones

$$f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) = D \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left\{ -B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left[A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \right] [\text{cos}(\theta) + \alpha \text{sin}(\theta)] \right\}},$$

pero $\alpha = 5^\circ = 0.01745\text{rad} \ll 1$, $\Rightarrow \alpha \text{sen}(\theta) \ll \text{cos}(\theta)$, entonces la función de distribución que maximiza la entropía es

$$f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) = D \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \right) \text{cos}(\theta) \right]}. \quad (7.23)$$

7.2. Método de Chapmann-Enskog

El desarrollo matemático riguroso de este método fue dado por Hilbert, una versión más práctica fue elaborada por D. Enskog y S. Chapman, de manera independiente, de ahí que se le diera el nombre de método de Chapmann-Enskog. En general, éste permite obtener una "medida" de que tanto se aleja un gas simple de su estado de equilibrio local debido a los gradientes (inhomogeneidades) espaciales [44].

Si la ecuación de Boltzmann (4.23) se expresa en la forma general $\xi(f) = 0$, donde

$$\xi(f) = \frac{Df}{Dt} - I_{\text{Auto-Difusión}}(f) - I_{\text{Colisión}}(f) = 0$$

son las operaciones aplicadas sobre la desconocida función f [48]. El método se basa en dos hipótesis:

La solución se puede expresar como una serie infinita, es decir,

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)} = f^{(0)} + f^{(1)} + f^{(2)} + f^{(3)} + \dots, \quad (7.24)$$

cuando ξ opera sobre esta serie, el resultado es una serie en la que el r -ésimo término involucra los primeros r términos, es decir

$$\begin{aligned} \xi(f) &= \xi \left(f^{(0)} + f^{(1)} + f^{(2)} + f^{(3)} + \dots \right) \\ &= \xi \left(f^{(0)} \right) + \xi \left(f^{(0)}, f^{(1)} \right) + \xi \left(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)} \right) + \dots \end{aligned}$$

La suma de las funciones $f^{(r)}$ será solución de $\xi(f) = 0$, si se cumplen las condiciones impuestas por las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} \xi(f^{(0)}) &= 0 \\ \xi(f^{(0)}, f^{(1)}) &= 0 \\ \xi(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(1)}) &= 0 \\ &\vdots \end{aligned}$$

que juntas aseguran que $\xi(f) = 0$. Cada ecuación contiene una incógnita cuando todas las ecuaciones anteriores han sido resueltas. La división $\xi(f)$ no es única, debe hacerse de tal manera que las ecuaciones sean solubles [48].

Hipótesis de equilibrio local A tiempos $t \sim t_{macroscópico}$ la dependencia temporal de la función f sólo ocurre a través de las variables lentas o conservadas $\rho(\mathbf{r}, t)$, $u(\mathbf{r}, t)$ y $\varepsilon(\mathbf{r}, t)$. En un lenguaje más preciso, se supone que f es una funcional de las variables conservadas [44]

$$f[\mathbf{r}, \mathbf{v}, \rho(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \varepsilon(\mathbf{r}, t)]. \quad (7.25)$$

Si se trunca el desarrollo de la función de distribución en dos términos, la solución de SPPBE (ec. (4.24)) que se encontrará es de la forma

$$f(\mathbf{r}, \theta, t) = f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) + f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t), \quad (7.26)$$

donde $f^{(0)} = f_{(l)}$ (7.23) es la distribución que caracteriza al equilibrio local encontrada con el Método de Máxima Entropía y $f^{(1)}$ la función que mide la desviación lineal del sistema respecto a dicho estado. Al sustituir esta solución en la ecuación de Boltzmann y tomando en cuenta que son precisamente los operadores del miembro izquierdo de dicha ecuación los que provocan que el sistema no esté en equilibrio local, basta considerar $f_{(l)}$ en el miembro izquierdo [41], obteniendo

$$\frac{\partial f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) = I_{Auto-Difusión}[f(\mathbf{r}, \theta, t)] + I_{Colisión}[f(\mathbf{r}, \theta, t), f(\mathbf{r}, \theta, t)],$$

debido a la complejidad de las integrales del lado derecho, una simplificación que permite avanzar es considerar el término $I_{Colisión}[f(\mathbf{r}, \theta, t)f(\mathbf{r}, \theta, t)] = 0$, al sustituir la solución (7.26) se tiene

$$\frac{\partial f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) = I_{Auto-Difusión}[f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) + f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t)].$$

Uno de los resultados del método tradicional aplicado a gases consiste en que el término de interacción se anula en el estado de equilibrio, extendiendo esto

$$\Rightarrow I_{Auto-Difusión}[f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t)] = 0, \quad (7.27)$$

es decir, la función $f_{(l)}$ de equilibrio local en el caso de bacterias también anula el término que ahora representa la interacción. Entonces

$$\frac{\partial f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) = I_{Auto-Difusión}[f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t)]. \quad (7.28)$$

de esta expresión podremos obtener la expresión para $f^{(1)}$.

Las funciones $f_{(l)}$ y $f^{(1)}$ dependen del tiempo a través de las variables macroscópicas relevantes

$$f_{(l)} = f_{(l)}[\theta, \rho(\mathbf{r}, t), u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)] \quad , \quad f^{(1)} = f^{(1)}[\theta, \rho(\mathbf{r}, t), u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)],$$

el desarrollo del término de arrastre es

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{(l)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_{(l)} &= \frac{\partial f_{(l)}}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial f_{(l)}}{\partial u_{\bar{\theta}}} \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} \right)_{(l)} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_{(l)}}{\partial \rho} \nabla \rho + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_{(l)}}{\partial u_{\bar{\theta}}} \nabla (u_{\bar{\theta}})_{(l)} \\ &= \frac{\partial f_{(l)}}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \right) + \frac{\partial f_{(l)}}{\partial u_{\bar{\theta}}} \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla u_{\bar{\theta}} \right)_{(l)} \end{aligned}$$

tomando en cuenta que $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \right) = 0$, expresión que cumple la densidad como solución de la ecuación de Boltzmann (5.11), resulta

$$\frac{\partial f_{(l)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_{(l)} = \frac{\partial f_{(l)}}{\partial u_{\bar{\theta}}} \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla u_{\bar{\theta}} \right)_{(l)}, \quad (7.29)$$

sustituyendo (7.29) en (7.28)

$$\frac{\partial f_{(l)}}{\partial u_{\bar{\theta}}} \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla u_{\bar{\theta}} \right)_{(l)} = I_{Auto-Difusión}[f^{(1)}], \quad (7.30)$$

el término del lado derecho es

$$I_{Auto-Difusión}[f^{(1)}] = -\lambda f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta', t),$$

al realizar las integrales en θ' y η del segundo término, podremos factorizar la función $f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t)$, se introduce el parámetro Λ que contiene el resultado de tales integrales, resultando

$$\frac{\partial f_{(l)}}{\partial u_{\bar{\theta}}} \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla u_{\bar{\theta}} \right)_{(l)} = \Lambda f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t), \quad (7.31)$$

como una primera aproximación consideramos Λ como una constante, un caso más real será considerarla como una función que depende del ruido (η) o del ancho de su distribución (σ). De acuerdo con (7.22)

$$\begin{aligned} f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) &= D \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \\ \Rightarrow \frac{\partial f_{(l)}}{\partial u_{\bar{\theta}}} &= \left[-\frac{B_1}{v_0} - \frac{A_1}{v_0} \cos(\theta) \right] f_{(l)}(\mathbf{r}, \theta, t) \\ &= \left[-\frac{B_1 D}{v_0} - \frac{A_1 D}{v_0} \cos(\theta) \right] \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]}. \end{aligned} \quad (7.32)$$

De acuerdo con el sistema de referencia $(q_{\bar{\theta}}, q_{\perp})$ el vector nabla tiene la forma

$$\nabla = \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \quad (7.33)$$

por lo tanto, el término $(\mathbf{v} \cdot \nabla u_A)$ es

$$\begin{aligned} (\mathbf{v} \cdot \nabla u_{\bar{\theta}})_{(l)} &= v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \cdot \nabla u_{\bar{\theta}} \\ &= v_0 [\cos(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \sin(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\perp}] \cdot \left(\hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \right) u_{\bar{\theta}} \\ &= v_0 \cos(\theta) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + v_0 \sin(\theta) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}}. \end{aligned} \quad (7.34)$$

La derivada parcial $\left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t}\right)_{(l)}$ se puede obtener de la ecuación de balance del momento (6.30), escrita a continuación

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)] + \nabla \cdot \underline{P}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} I_{Auto-Difusión}[f(\mathbf{r}, \theta, t)],$$

ecuación integro-diferencial para las variables macroscópicas ($u_{\bar{\theta}}$, ρ), donde el tensor de presiones (\underline{P}) y el término de interacción ($I_{Auto-Difusión}$) dependen de la función de distribución f y pueden desarrollarse usando al Método de Chapman-Enskog

$$f(\mathbf{r}, \theta, t) = \sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{r}, \theta, t), \quad (7.35)$$

al sustituir el desarrollo en el tensor de presiones se obtiene

$$\begin{aligned} \underline{P}(\mathbf{r}, t) &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \theta, t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \mathbf{v} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{r}, \theta, t) \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \mathbf{v} f^{(n)}(\mathbf{r}, \theta, t) \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \underline{P}^{(n)}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (7.36)$$

el término de Auto-Difusión toma la forma

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} I_{Auto-Difusión}[f(\mathbf{r}, \theta, t)] &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} I_{Auto-Difusión} \left[\sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{r}, \theta, t) \right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} I_{Auto-Difusión} [f^{(n)}(\mathbf{r}, \theta, t)], \end{aligned} \quad (7.37)$$

entonces, la ecuación de balance es

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)] + \nabla \cdot \left[\sum_{n=0}^{\infty} \underline{P}^{(n)}(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} I_{Auto-Difusión} [f^{(n)}(\mathbf{r}, \theta, t)]. \quad (7.38)$$

La parcial $\left(\frac{\partial u_A}{\partial t}\right)_{(l)}$ calculada a orden (1), implica que sólo se considere el primer término del desarrollo de f

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\rho \mathbf{u}] + \nabla \cdot \underline{P}_{(l)}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} I_{Auto-Difusión}[f_{(l)}], \quad (7.39)$$

donde $\mathbf{u} = u_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}$ y $I_{Auto-Difusión}[f_{(l)}] = 0$ por la ecuación (7.27), resultando

$$\rho \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + u_{\bar{\theta}} \frac{\partial \rho}{\partial t} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \nabla \cdot \underline{P}_{(l)}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (7.40)$$

a partir de la Ecuación de Continuidad (6.21) se puede obtener $\frac{\partial \rho}{\partial t}$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho \mathbf{u}] = -\rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = -\rho \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} - u_{\bar{\theta}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \quad (7.41)$$

la ecuación (7.40) es ahora

$$\rho \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} - \left(\rho u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \nabla \cdot \underline{P}_{(l)}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (7.42)$$

El tensor de Presión a orden (1) es

$$\begin{aligned} \underline{P}_{(l)}(\mathbf{r}, t) &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \mathbf{v} f_{(l)} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0^2 \hat{\mathbf{e}}(\theta) \hat{\mathbf{e}}(\theta) D \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \\ &= v_0^2 D \rho e^{\left(-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} \right)} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \hat{\mathbf{e}}(\theta) \hat{\mathbf{e}}(\theta) e^{\left[- \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]}, \end{aligned} \quad (7.43)$$

donde el producto tensorial $\hat{\mathbf{e}}(\theta) \hat{\mathbf{e}}(\theta)$ tiene las componentes

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}(\theta) \hat{\mathbf{e}}(\theta) &= [\cos(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \sin(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\perp}] [\cos(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \sin(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\perp}] \\ &= \cos^2(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \cos(\theta) \sin(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} + \cos(\theta) \sin(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \sin^2(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \end{aligned}$$

y que en forma matricial es

$$\hat{\mathbf{e}}(\theta) \hat{\mathbf{e}}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2(\theta) & \cos(\theta) \sin(\theta) \\ \cos(\theta) \sin(\theta) & \sin^2(\theta) \end{pmatrix}, \quad (7.44)$$

si identificamos como \underline{B} a la matriz que resulta de las integrales de la expresión (7.43) y el tensor (7.44), ésta tiene la forma

$$\begin{aligned} \underline{B} &= \begin{pmatrix} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos^2(\theta) e^{\left[- \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} & \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta) \sin(\theta) e^{\left[- \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \\ \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta) \sin(\theta) e^{\left[- \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} & \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \sin^2(\theta) e^{\left[- \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2\pi \frac{I_1[A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2] + (A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2) I_2[A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2]}{(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2)} & 0 \\ 0 & \frac{2\pi I_1[A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2]}{(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (7.45)$$

tomando en cuenta que $A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 = v_0 A$, ecuación (7.19), y el despeje $\frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} = \frac{v_0 A - A_2}{A_1}$, resulta

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \underline{P}_{(l)}(\mathbf{r}, t) &= v_0^2 D \nabla \cdot \left[\rho e^{-B_1 \left(\frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right)} \underline{B} \right] \\ &= v_0^2 D \nabla \cdot \left[\rho e^{-B_1 \left(\frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right)} \begin{pmatrix} 2\pi \frac{I_1[v_0 A] + (v_0 A) I_2[v_0 A]}{v_0 A} & 0 \\ 0 & \frac{2\pi I_1[v_0 A]}{v_0 A} \end{pmatrix} \right] \\ &= v_0^2 D \nabla \cdot \left[\rho \begin{pmatrix} e^{-B_1 \left(\frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right)} 2\pi \frac{I_1[v_0 A] + (v_0 A) I_2[v_0 A]}{v_0 A} & 0 \\ 0 & e^{-B_1 \left(\frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right)} \frac{2\pi I_1[v_0 A]}{v_0 A} \end{pmatrix} \right], \end{aligned} \quad (7.46)$$

para simplificar, se definen las siguientes funciones

$$\begin{aligned} p_1(A) &= e^{-B_1 \left(\frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right)} 2\pi \frac{I_1[v_0 A] + (v_0 A) I_2[v_0 A]}{v_0 A} \\ p_2(A) &= e^{-B_1 \left(\frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right)} \frac{2\pi I_1[v_0 A]}{v_0 A}, \end{aligned} \quad (7.47)$$

entonces,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \underline{P}_{(l)}(\mathbf{r}, t) &= v_0^2 D \nabla \cdot \left[\rho \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix} \right] \\ &= v_0^2 D \nabla \cdot [\rho (p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp})] \\ &= v_0^2 D \nabla \cdot (\rho p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}) + v_0^2 D \nabla \cdot (\rho p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}), \end{aligned} \quad (7.48)$$

el vector resultante se calcula en el apéndice 9.2, expresión (9.6)

$$\nabla \cdot \underline{P}_{(l)}(\mathbf{r}, t) = v_0^2 D \nabla \cdot (\rho p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}) + v_0^2 D \nabla \cdot (\rho p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}) = v_0^2 D \begin{pmatrix} \rho \frac{\partial p_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + p_1 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ \rho \frac{\partial p_2}{\partial q_{\perp}} + p_2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix} \quad (7.49)$$

sustituyendo este resultado en la expresión (7.42) resulta

$$\rho \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} - \left(\rho u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + v_0^2 D \left(\rho \frac{\partial p_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + p_1 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + v_0^2 D \left(\rho \frac{\partial p_2}{\partial q_{\perp}} + p_2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\perp} = 0,$$

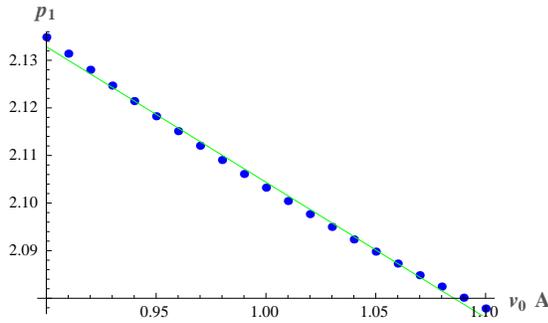
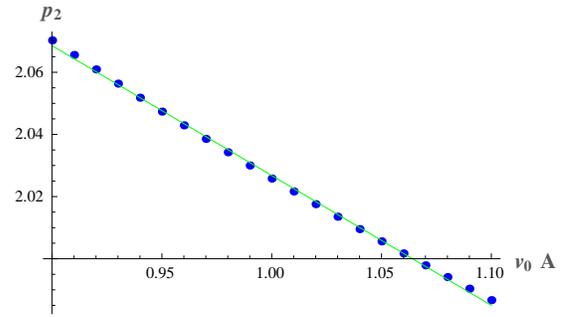
igualando cada componente a cero

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} : \quad & \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} - u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} - \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + v_0^2 D \frac{\partial p_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + v_0^2 D \frac{p_1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} = 0 \\ \hat{\mathbf{e}}_{\perp} : \quad & v_0^2 D \frac{\partial p_2}{\partial q_{\perp}} + v_0^2 D \frac{p_2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} = 0, \end{aligned}$$

cada componente depende de las funciones p_1 y p_2 , funciones que tienen comportamiento lineal cuando $Av_0 \approx 1$ como se muestra en las figuras 7.5 y 7.6, así que

$$\begin{aligned} v_0^2 D \frac{\partial p_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + v_0^2 D \frac{p_1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} &\approx v_0^2 D \frac{\partial [e_1 v_0 A + e_2]}{\partial q_{\bar{\theta}}} + v_0^2 D \frac{[e_1 v_0 A + e_2]}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ &= v_0^2 D \frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} \left[e_1 \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) + e_2 \right] + \frac{v_0^2 D}{\rho} \left[e_1 \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) + e_2 \right] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ &= E_1 v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{1}{\rho} [E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v_0^2 D \frac{\partial p_2}{\partial q_{\perp}} + v_0^2 D \frac{p_2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} &\approx v_0^2 D \frac{\partial [e_3 v_0 A + e_4]}{\partial q_{\perp}} + \frac{[e_3 v_0 A + e_4]}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \\ &= v_0^2 D \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \left[e_3 \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) + e_4 \right] + \frac{v_0^2 D}{\rho} \left[e_3 \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) + e_4 \right] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \\ &= E_3 v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \frac{1}{\rho} [E_3 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_4 v_0^2] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}}. \end{aligned}$$

Figura 7.5: Ajuste lineal de p_1 .Figura 7.6: Ajuste lineal de p_2 .

Las constantes utilizadas se encuentran reportadas en 9.2. Al sustituir las expresiones anteriores en cada componente

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} - u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} - \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + E_1 v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{1}{\rho} [E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} = (u_{\bar{\theta}} - E_1 v_0) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \left[\frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} - \frac{1}{\rho} (E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2) \right] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \end{aligned} \quad (7.50)$$

$$\begin{aligned} E_3 v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \frac{1}{\rho} [E_3 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_4 v_0^2] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \frac{1}{\rho} \left(u_{\bar{\theta}} + \frac{E_4}{E_3} v_0 \right) \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} &= 0 \end{aligned} \quad (7.51)$$

el valor de las constantes e_1 , e_2 , e_3 , e_4 , $E_1 = De_1 A_1$, $E_2 = D(e_1 A_2 + e_2)$, $E_3 = De_3 A_1$, $E_4 = D(e_3 A_2 + e_4)$, están en el cuadro 9.2.

La expresión (7.50) es la análoga de la Ecuación de Euler para fluidos. La ecuación de Euler es fundamental en la dinámica de fluidos, describe el movimiento de un elemento de fluido. Obtenida por primera vez por L. Euler en 1755. Válida en fluidos ideales, en los que carecen de importancia la conductividad térmica y la viscosidad, cuya forma general es

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{grad}) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \mathbf{grad} p .$$

Esta ecuación es la segunda ley de Newton aplicada a un elemento de volumen, el lado izquierdo es el producto de la masa por unidad de volumen (ρ) por la aceleración $\frac{D\mathbf{u}}{dt}$, derivada que representa la variación respecto al tiempo de la velocidad de una partícula fluida (volumen) cuando se mueve en el espacio; sobre la unidad de volumen de fluido actúa una fuerza $-\mathbf{grad} p$, debida a la presión que ejerce el fluido que lo rodea.

Para obtener la expresión (7.31) se suman los términos (7.34) y (7.50), que agrupando términos

es

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla u_{\bar{\theta}} \right)_{(l)} \\ &= [u_{\bar{\theta}} - E_1 v_0 + v_0 \cos(\theta)] \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \left[\frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} - \frac{1}{\rho} (E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2) \right] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + v_0 \sin(\theta) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}}. \end{aligned} \quad (7.52)$$

La expresión de $f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t)$ se obtiene despejando de la ecuación (7.31) y sustituyendo las expresiones (7.32) y (7.52)

$$\begin{aligned} & f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) \\ &= \frac{1}{\Lambda} \frac{\partial f_{(l)}}{\partial u_{\bar{\theta}}} \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla u_{\bar{\theta}} \right)_{(l)} \\ &= \frac{1}{\Lambda} \left[-\frac{B_1 D}{v_0} - \frac{A_1 D}{v_0} \cos(\theta) \right] \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \\ & \times \left\{ [u_{\bar{\theta}} - E_1 v_0 + v_0 \cos(\theta)] \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \left[\frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} - \frac{1}{\rho} (E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2) \right] \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + v_0 \sin(\theta) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} \right\} \end{aligned} \quad (7.53)$$

La expresión anterior depende de varias constantes (reportadas en el cuadro 9.2) y de la variable macroscópica $u_{\bar{\theta}}$, que a partir de su gráfica (figura 7.4) sabemos el rango de valores en el que se encuentra ($0.41 \leq u_{\bar{\theta}} \leq 0.485$), así que hay términos de la expresión anterior que son pequeños comparados con otros

$$\begin{aligned} u_{\bar{\theta}} &> -E_1 v_0 + v_0 \cos(\theta) + v_0 \sin(\theta), \\ u_{\bar{\theta}}^2 &> -(E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2) \\ v_0 \sin(\theta) &\ll 1, \end{aligned} \quad (7.54)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) \\ &= \frac{1}{\Lambda} \left[-\frac{B_1 D}{v_0} - \frac{A_1 D}{v_0} \cos(\theta) \right] \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] \end{aligned} \quad (7.55)$$

esta función es una perturbación de la solución de equilibrio local, y como tal forma parte de la solución fuera del equilibrio.

Con el objetivo de obtener una ecuación con la estructura de Navier-Stokes para gases, se consideran los dos primeros términos del desarrollo de f en la ecuación de balance del momento (7.38), es decir

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)] + \nabla \cdot \left[\sum_{n=0}^2 \underline{P}^{(n)}(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{n=0}^2 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} I_{Auto-Disfusión}[f^{(n)}]$$

la ecuación es

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho \mathbf{u}] + \nabla \cdot \underline{P}_{(l)} + \nabla \cdot \underline{P}^{(1)} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \left\{ I_{Auto-Disfusión}[f^{(1)}] \right\}, \quad (7.56)$$

el término $\nabla \cdot P_{(l)}(\mathbf{r}, t)$ está dado por la expresión (9.6), $I_{dif}[f_{(l)}(\mathbf{r}, t)] = 0$ por la condición (7.27), el desarrollo de los términos que dependen de $f^{(1)}$, ecuación (7.69) son el Tensor de Presión de orden uno y el término de Auto-Difusión, el primero de ellos es

$$\begin{aligned}
\underline{P}^{(1)} &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v}\mathbf{v} f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0^2 \mathbf{e}(\theta)\mathbf{e}(\theta) \frac{1}{\Lambda} \left[-\frac{B_1 D}{v_0} - \frac{A_1 D}{v_0} \cos(\theta) \right] \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \\
&\times \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] \\
&= -\frac{D v_0}{\Lambda} \rho \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} \right]} \\
&\times \left[B_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{e}(\theta)\mathbf{e}(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} + A_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{e}(\theta)\mathbf{e}(\theta) \cos(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \right]
\end{aligned} \tag{7.57}$$

se define la siguiente función $R(\mathbf{r}, t)$ para expresar de una forma más simple las integrales

$$R = -\frac{D v_0}{\Lambda} \rho \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} \right]} = -\frac{D v_0}{\Lambda} \rho \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right]},$$

donde se ha sustituido la ecuación (7.19) y la dependencia en $u_{\bar{\theta}}$ cambia por el producto $v_0 A$. Expresando la integral con la función R y el cambio de variable toma la forma

$$\begin{aligned}
\underline{P}^{(1)} &= R \left[B_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{e}(\theta)\mathbf{e}(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - A v_0 \cos(\theta) \right]} + A_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{e}(\theta)\mathbf{e}(\theta) \cos(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - A v_0 \cos(\theta) \right]} \right] \\
&= I_1 + I_2,
\end{aligned}$$

las integrales toman la siguiente forma al considerar que el tensor $\mathbf{e}(\theta)\mathbf{e}(\theta)$ es la matriz (7.44)

$$\begin{aligned}
I_1 &= R B_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{e}(\theta)\mathbf{e}(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - A v_0 \cos(\theta) \right]} \\
&= R B_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \begin{pmatrix} \cos^2(\theta) & \cos(\theta)\text{sen}(\theta) \\ \cos(\theta)\text{sen}(\theta) & \text{sen}^2(\theta) \end{pmatrix} e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - A v_0 \cos(\theta) \right]} \\
&= R B_1 \begin{pmatrix} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos^2(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - A v_0 \cos(\theta) \right]} & \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta)\text{sen}(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - A v_0 \cos(\theta) \right]} \\ \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta)\text{sen}(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - A v_0 \cos(\theta) \right]} & \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \text{sen}^2(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - A v_0 \cos(\theta) \right]} \end{pmatrix} \\
&= R B_1 \begin{pmatrix} 2\pi \frac{I_1(v_0 A) + (v_0 A) I_2(v_0 A)}{v_0 A} & 0 \\ 0 & \frac{2\pi I_1(v_0 A)}{v_0 A} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{7.58}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= RA_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{e}(\theta) \mathbf{e}(\theta) \cos(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - Av_0 \cos(\theta)\right]} \\
&= RA_1 \left(\begin{array}{cc} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos^3(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - Av_0 \cos(\theta)\right]} & \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta)^2 \text{sen}(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - Av_0 \cos(\theta)\right]} \\ \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta)^2 \text{sen}(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - Av_0 \cos(\theta)\right]} & \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta) \text{sen}^2(\theta) e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} - Av_0 \cos(\theta)\right]} \end{array} \right) \\
&= RA_1 \left(\begin{array}{cc} 2\pi \frac{3I_2(v_0 A) + (v_0 A)I_3(v_0 A)}{v_0 A} & 0 \\ 0 & \frac{2\pi I_2(v_0 A)}{v_0 A} \end{array} \right),
\end{aligned} \tag{7.59}$$

en términos de vectores unitarios

$$\begin{aligned}
\underline{P}^{(1)} &= I_1 + I_2 \\
&= R \left[B_1 2\pi \frac{I_1(v_0 A) + (v_0 A)I_2(v_0 A)}{v_0 A} + A_1 2\pi \frac{3I_2(v_0 A) + (v_0 A)I_3(v_0 A)}{v_0 A} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
&\quad + R \left[B_1 \frac{2\pi I_1(v_0 A)}{v_0 A} + A_1 \frac{2\pi I_2(v_0 A)}{v_0 A} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}
\end{aligned}$$

sustituyendo la función R

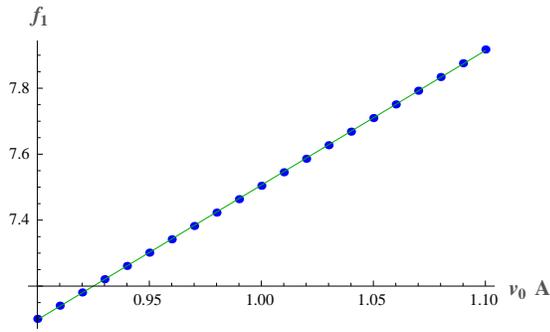
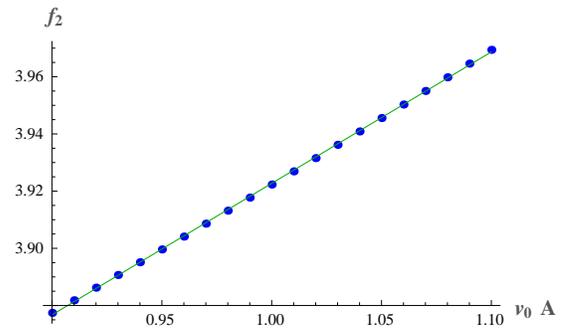
$$\begin{aligned}
\underline{P}^{(1)} &= I_1 + I_2 \\
&= -\frac{D v_0}{\Lambda} \rho \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1}\right]} \\
&\quad \times \left[B_1 2\pi \frac{I_1(v_0 A) + (v_0 A)I_2(v_0 A)}{v_0 A} + A_1 2\pi \frac{3I_2(v_0 A) + (v_0 A)I_3(v_0 A)}{v_0 A} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
&\quad - \frac{D v_0}{\Lambda} \rho \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1}\right]} \left[B_1 \frac{2\pi I_1(v_0 A)}{v_0 A} + A_1 \frac{2\pi I_2(v_0 A)}{v_0 A} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
&= -\frac{D v_0}{\Lambda} F [f_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + f_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}]
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
F &= \rho u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\
f_1 &= e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1}\right]} \left[B_1 2\pi \frac{I_1(v_0 A) + (v_0 A)I_2(v_0 A)}{v_0 A} + A_1 2\pi \frac{3I_2(v_0 A) + (v_0 A)I_3(v_0 A)}{v_0 A} \right] \\
f_2 &= e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1}\right]} \left[B_1 \frac{2\pi I_1(v_0 A)}{v_0 A} + A_1 \frac{2\pi I_2(v_0 A)}{v_0 A} \right]
\end{aligned}$$

Las funciones f_1 y f_2 se ajustan linealmente como se muestra en 7.7 y 7.8, de manera que

$$\begin{aligned}
f_1[u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)] &\approx d_1 v_0 A + d_2 = d_1 \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2 \right) + d_2 = d_1 A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + d_1 A_2 + d_2, \\
f_2[u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)] &\approx d_3 v_0 A + d_4 = d_3 A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + d_3 A_2 + d_4
\end{aligned} \tag{7.60}$$

Figura 7.7: Ajuste lineal de f_1 .Figura 7.8: Ajuste lineal de f_2 .

entonces

$$\begin{aligned} \underline{P}^{(1)} = & -\frac{D v_0}{\Lambda} F \left[\rho, u_{\bar{\theta}}, \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}}, \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] f_1[u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\ & - \frac{D v_0}{\Lambda} F \left[\rho, u_{\bar{\theta}}, \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}}, \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] f_2[u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}, \end{aligned} \quad (7.61)$$

que se ha escrito con la dependencia en las variables macroscópicas y sus gradientes, de manera que se puede ver que al obtener la divergencia de este tensor, se obtendrán segundas derivadas espaciales al derivar la función F , derivadas que forman la estructura de la ecuación de Navier-Stokes. El resultado (9.7) del cálculo de la divergencia del tensor \underline{P}^1 se encuentra en el apéndice 9.2

$$\nabla \cdot \underline{P}^{(1)}(\mathbf{r}, t) = -\frac{D v_0}{\Lambda} \begin{pmatrix} F \frac{\partial f_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + f_1 \frac{\partial F}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ F \frac{\partial f_2}{\partial q_{\perp}} + f_2 \frac{\partial F}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) \frac{\partial f_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) f_1 \frac{\partial F}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ F \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) \frac{\partial f_2}{\partial q_{\perp}} + \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) f_2 \frac{\partial F}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix} \quad (7.62)$$

cada término es

$$\begin{aligned} F \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) \frac{\partial f_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} &= \left(\rho u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right) \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) \frac{d_1 A_1}{v_0} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ &= \frac{D_1}{\Lambda} \rho u_{\bar{\theta}} \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + \frac{D_1}{\Lambda} u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \end{aligned} \quad (7.63)$$

$$\begin{aligned} \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) f_1 \frac{\partial F}{\partial q_{\bar{\theta}}} &= \left(\frac{D_1}{\Lambda} u_{\bar{\theta}} + \frac{D_2}{\Lambda} v_0 \right) \frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} \left(\rho u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right) \\ &= \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (D_1 u_{\bar{\theta}} + D_2 v_0) \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + \rho (D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \\ &+ \frac{1}{\Lambda} \left[3(D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (D_1 u_{\bar{\theta}}^3 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \end{aligned} \quad (7.64)$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow F \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) \frac{\partial f_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) f_1 \frac{\partial F}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\
&= \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (2D_1 u_{\bar{\theta}} + D_2 v_0) \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + \rho (D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \\
&\quad + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (D_1 u_{\bar{\theta}}^3 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right]
\end{aligned} \tag{7.65}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow F \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) \frac{\partial f_2}{\partial q_{\perp}} + \left(-\frac{D v_0}{\Lambda} \right) f_2 \frac{\partial F}{\partial q_{\perp}} \\
&= \frac{D_3}{\Lambda} \rho u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \frac{D_3}{\Lambda} u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \left(\frac{D_3}{\Lambda} u_{\bar{\theta}} + \frac{D_4}{\Lambda} v_0 \right) \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \left(\rho u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right) \\
&= \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (2D_3 u_{\bar{\theta}} + D_4 v_0) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \rho (D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \\
&\quad + \frac{1}{\Lambda} (4D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} + (D_3 u_{\bar{\theta}}^3 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}}
\end{aligned} \tag{7.66}$$

entonces (7.62) es

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \underline{P}^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (2D_1 u_{\bar{\theta}} + D_2 v_0) \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + \rho (D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
&\quad + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (D_1 u_{\bar{\theta}}^3 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
&\quad + \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (2D_3 u_{\bar{\theta}} + D_4 v_0) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \rho (D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
&\quad + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} + (D_3 u_{\bar{\theta}}^3 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp}
\end{aligned}$$

El valor de las constantes se encuentra en el cuadro 9.2 del apéndice de constantes. De cálculos anteriores se obtuvo

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[\rho \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} - \rho u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} - u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}$$

$$\nabla \cdot \underline{P}^{(l)} = \begin{pmatrix} E_1 \rho v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2) \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ E_3 \rho v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + (E_3 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_4 v_0^2) \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix}, \tag{7.67}$$

de manera que el miembro izquierdo de la expresión (7.56)

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho \mathbf{u}] + \nabla \cdot \underline{P}^{(l)} + \nabla \cdot \underline{P}^{(1)} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \left\{ I_{Auto-Disfusión}[f^{(1)}] \right\},$$

es

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}[\rho \mathbf{u}] + \nabla \cdot \underline{P}_{(l)} + \nabla \cdot \underline{P}^{(1)} = & \left[\rho \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \rho(E_1 v_0 - u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2 - u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (2D_1 u_{\bar{\theta}} + D_2 v_0) \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + \rho (D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (D_1 u_{\bar{\theta}}^3 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \left(E_3 \rho v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + (E_3 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_4 v_0^2) \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (2D_3 u_{\bar{\theta}} + D_4 v_0) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \rho (D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} + (D_3 u_{\bar{\theta}}^3 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp}
\end{aligned} \tag{7.68}$$

El desarrollo del término de interacción de la ecuación (7.56) es

$$\mathbf{B}_{A-D} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \left\{ I_{Auto-Difusión}[f^{(1)}(\mathbf{r}, t)] \right\}$$

donde

$$I_{Auto-Difusión}[f^{(1)}] = -\lambda f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta', t),$$

entonces

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_{A-D} &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} \left\{ -\lambda f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta', t) \right\} \\
&= -\lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p_0(\eta) \delta(\theta' + \eta - \theta) \mathbf{v} f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta', t) \\
&= \mathbf{B}_{A-D 1} + \mathbf{B}_{A-D 2},
\end{aligned}$$

como $\mathbf{B}_{A-D 2}$ es una integral triple de la forma de las que no hemos calculado en este trabajo, sólo se deja indicada, así que el desarrollo del primer término es

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_{A-D 1}(\mathbf{r}, t) &= -\lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \mathbf{v} f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) \\
&= -\lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0 \hat{\mathbf{e}}(\theta) f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) \\
&= -\lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta v_0 [\cos(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \text{sen}(\theta) \hat{\mathbf{e}}_{\perp}] \\
&\quad \times \frac{1}{\Lambda} \left[-\frac{B_1 D}{v_0} - \frac{A_1 D}{v_0} \cos(\theta) \right] \rho e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} - (A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + A_2) \cos(\theta) \right]} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow f^{(1)}(\mathbf{r}, \theta, t) \\
&= \frac{1}{\Lambda} \left[-\frac{B_1 D}{v_0} - \frac{A_1 D}{v_0} \cos(\theta) \right] \rho(\mathbf{r}, t) e^{\left[-B_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} - \left(A_1 \frac{u_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}, t)}{v_0} + A_2 \right) \cos(\theta) \right]} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right]
\end{aligned} \tag{7.69}$$

$\mathbf{B}_{A-D 1}$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\lambda D \rho}{\Lambda} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right]} \\
&\quad \times \left\{ B_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta) e^{[-v_0 A \cos(\theta)]} + A_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta)^2 e^{[-v_0 A \cos(\theta)]} \right\} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
&+ \frac{\lambda D \rho}{\Lambda} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right]} \\
&\quad \times \left\{ B_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \sin(\theta) e^{[-v_0 A \cos(\theta)]} + A_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta) \sin(\theta) e^{[-v_0 A \cos(\theta)]} \right\} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
&= \frac{\lambda D \rho}{\Lambda} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right]} \left\{ B_1 2\pi I_1[v_0 A] + A_1 2\pi \frac{I_1[v_0 A] + v_0 A I_2[v_0 A]}{v_0 A} \right\} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
&= \frac{\lambda D \rho}{\Lambda} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] \\
&\quad \times \left\{ B_1 e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right]} 2\pi I_1[v_0 A] + A_1 e^{\left[-B_1 \frac{v_0 A - A_2}{A_1} \right]} 2\pi \frac{I_1[v_0 A] + v_0 A I_2[v_0 A]}{v_0 A} \right\} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
&= \frac{\lambda D \rho}{\Lambda} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] (D P_3) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} = \frac{\lambda \rho}{\Lambda} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] [D (d_5 v_0 A + d_6)] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
&= \frac{\lambda \rho}{\Lambda} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] \left(E_5 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + E_6 \right) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}},
\end{aligned} \tag{7.70}$$

donde se ha ajustado linealmente la función P_3 , como lo muestra la figura 7.9, las constantes d_1, d_2, E_3, E_4 se encuentran en el cuadro 9.2.

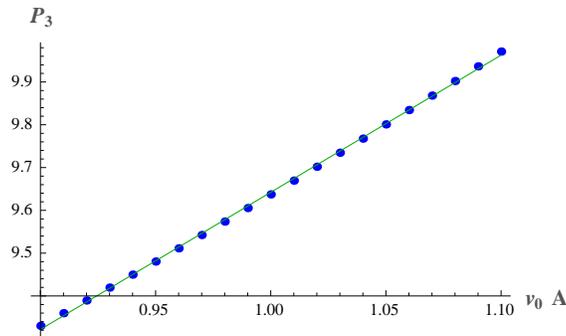


Figura 7.9: Ajuste lineal de P_3

Para obtener (7.56) se iguala la expresión (7.68) a la suma de la expresión anterior y $\mathbf{B}_{A-D} 2$

$$\begin{aligned}
& \left[\rho \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \rho(E_1 v_0 - u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2 - u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (2D_1 u_{\bar{\theta}} + D_2 v_0) \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + \rho (D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (D_1 u_{\bar{\theta}}^3 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \left(E_3 \rho v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + (E_3 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_4 v_0^2) \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[\rho (2D_3 u_{\bar{\theta}} + D_4 v_0) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + \rho (D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} + (D_3 u_{\bar{\theta}}^3 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
& = \frac{\lambda \rho}{\Lambda} \left[u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} + \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right] \left(E_5 \frac{u_{\bar{\theta}}}{v_0} + E_6 \right) \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \mathbf{B}_{A-D} 2
\end{aligned}$$

finalmente dividiendo entre ρ la ecuación anterior

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \left[E_1 v_0 - u_{\bar{\theta}} - \frac{\lambda}{\Lambda} \left(E_5 \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{v_0} + E_6 u_{\bar{\theta}} \right) \right] \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right\} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \left[E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2 - u_{\bar{\theta}}^2 + \frac{\lambda}{\Lambda} \left(E_5 \frac{u_{\bar{\theta}}^3}{v_0} + E_6 u_{\bar{\theta}}^2 \right) \right] \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(2D_1 u_{\bar{\theta}} + D_2 v_0) \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + (D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (D_1 u_{\bar{\theta}}^3 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \quad (7.71) \\
& + \left(E_3 v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + (E_3 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_4 v_0^2) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(2D_3 u_{\bar{\theta}} + D_4 v_0) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + (D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} + (D_3 u_{\bar{\theta}}^3 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \\
& = \mathbf{B}_{A-D} 2,
\end{aligned}$$

La ecuación anterior tiene la estructura de la ecuación de Navier-Stokes que describe fluidos viscosos. Es una ecuación no lineal de las variables u_A y ρ , expresada en las coordenadas espaciales $(q_{\bar{\theta}}, q_{\perp})$. Los coeficientes depende de los parámetros microscópicos del sistema, v_0 velocidad individual de las partículas, parámetro λ probabilidad por unidad de tiempo de que el ángulo de dirección cambie, así como de constantes adimensionales reportadas en el

cuadro 9.2. Las ecuaciones de Navier Stokes también son funciones del parámetro Λ introducido por la integral que habrá que realizar en el futuro.

La ecuación vectorial de Navier-Stokes es un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen el movimiento de un fluido viscoso. Se obtiene al considerar en la ecuación de fluidos ideales (Ecuación de Euler)

$$\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial q_k} \right) = - \frac{\partial p}{\partial q_i}, \quad (7.72)$$

la transferencia de impulso "ideal" y reversible, debida al transporte mecánico de las distintas partículas de fluido de un lugar a otro y a las fuerzas de presión que actúan en dicho fluido; la transferencia de impulso "viscoso" e irreversible en el fluido, que produce viscosidad (rozamiento interno-partículas con velocidad diferente, movimiento relativo en partes del fluido) debido a transferencia de impulso de puntos en donde la velocidad es grande a otros puntos donde la velocidad es pequeña. Así, se tiene

$$\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial q_k} \right) = - \frac{\partial p}{\partial q_i} + \eta \frac{\partial^2 v_i}{\partial q_k \partial q_k} + \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial v_l}{\partial q_l}, \quad (7.73)$$

como

$$\frac{\partial v_l}{\partial q_l} \equiv \text{div } \mathbf{v} \quad , \quad \frac{\partial^2 v_i}{\partial q_k \partial q_k} \equiv \Delta v_i$$

la ecuación de movimiento de un fluido viscoso en forma vectorial es

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{grad}) \mathbf{v} \right] = - \mathbf{grad} p + \eta \Delta \mathbf{v} + \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) \mathbf{grad} \text{div } \mathbf{v}. \quad (7.74)$$

Si el flujo puede considerarse como incompresible ($\text{div } \mathbf{v} = 0$), entonces, la ecuación que lo describe es

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{grad}) \mathbf{v} = - \frac{1}{\rho} \mathbf{grad} p + \frac{\eta}{\rho} \Delta \mathbf{v}, \quad (7.75)$$

ecuación de Claude-Louis Navier y George Gabriel Stokes, llamada ecuación de Navier-Stokes.

8

Discusiones

El presente trabajo consiste en la aplicación de la Teoría Cinética en la descripción de un sistema biológico formado de bacterias peritricas consideradas como partículas puntuales que se mueven en un plano (2D) sin la influencia de fuerzas externas y que se mueven en la misma dirección como resultado de la interacción entre ellas. Se realizó la revisión de las características principales de este tipo de bacterias. Puesto que las bacterias son organismos muy pequeños (entre $0.5\mu\text{m}$ y $5\mu\text{m}$ de largo, $5\mu\text{m}$ de ancho), se revisó el comportamiento de microorganismos en medios acuosos. Capítulo 2.

En el capítulo 4 se incluyen las ideas básicas de la teoría cinética de gases, para establecer las analogías y consideraciones necesarias para la descripción de una colonia de bacterias y obtener la ecuación SPPBE (*Self-Propelled Particles Boltzmann Equation*). La ecuación tipo Boltzmann SPPBE del modelo de Gregoire y colaboradores [1] considera que las bacterias no cambian su dirección de movimiento hasta que experimentan auto-difusión (movimiento angular caótico) o colisión elástica con otra bacteria. Se probó que la función de distribución que proponen en [1] y que depende de la densidad uniforme es solución de la ecuación SPPBE, también se demostró un caso mas general, en que la función de distribución depende de la densidad local, Capítulo 5.

En el caso de gases se pueden obtener las ecuaciones de conservación para los invariantes colisionales (masa, ímpetu molecular y energía), al multiplicar la ecuación de Boltzmann por cada invariante e integrar con respecto a la velocidad microscópica. Los invariantes $\psi_i(\mathbf{v})$, funciones de la velocidad microscópica cumplen

$$\begin{aligned}\Delta\psi_i &= \int d\mathbf{v} \psi_i(\mathbf{v}) J(f, f) \\ &= \frac{1}{4} \int d\mathbf{v} [\psi_i(\mathbf{v}) + \psi_i(\mathbf{v}_1) - \psi_i(\mathbf{v}') - \psi_i(\mathbf{v}'_1)] J(f, f) = 0,\end{aligned}\tag{8.1}$$

porque éstas cantidades son las mismas antes y después de la colisión por tratarse de colisiones elásticas. En el caso de bacterias, solo hay un invariante colisional, la masa, y por lo tanto una

ecuación de conservación macroscópica, la de Continuidad. Ésta se encuentra en la mayoría de los modelos de bacterias [6], [7]. El modelo utilizado sólo considera a las bacterias, el fluido que rodea a las bacterias se sustituye por un ruido, lo que provoca que no haya conservación de momento lineal y la obtención de una ecuación de balance para el ímpetu. Tampoco existe conservación de energía, las bacterias se auto-propulsan, mientras se inyecte al sistema en forma externa la energía suficiente. Capítulo 6.

La ecuación de Continuidad y la ecuación de balance del ímpetu no son ecuaciones cerradas, porque el tensor de presiones no depende de las variables macroscópicas ρ y \mathbf{u} , al aplicar el método de Chapman-Enskog encontramos ecuaciones de evolución para la velocidad con la estructura de las ecuaciones hidrodinámicas para un fluido: ideal, conocida como ecuación de Euler para el orden cero en f ; viscoso, ecuación de Navier-Stokes cuando f se considera hasta el orden uno. Capítulo 7. A continuación se hace una comparación de la ecuación tipo Navier-Stokes obtenida a partir de la ecuación SPPBE (7.71) del enfoque cinético y la ecuación (3.2) comentada en la sección 3.2 de origen fenomenológico, la primera es

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} : & \quad \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + \left[E_1 v_0 - u_{\bar{\theta}} - \frac{\lambda}{\Lambda} \left(E_5 \frac{u_{\bar{\theta}}^2}{v_0} + E_6 u_{\bar{\theta}} \right) \right] \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\
& + \left[E_1 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_2 v_0^2 - u_{\bar{\theta}}^2 + \frac{\lambda}{\Lambda} \left(E_5 \frac{u_{\bar{\theta}}^3}{v_0} + E_6 u_{\bar{\theta}}^2 \right) \right] \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(2D_1 u_{\bar{\theta}} + D_2 v_0) \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + (D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_1 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + (D_1 u_{\bar{\theta}}^3 + D_2 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \right] = (\mathbf{B}_{A-D})_{\bar{\theta}} \\
\hat{\mathbf{e}}_{\perp} : & \quad E_3 v_0 \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + (E_3 v_0 u_{\bar{\theta}} + E_4 v_0^2) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(2D_3 u_{\bar{\theta}} + D_4 v_0) \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} + (D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] \\
& + \frac{1}{\Lambda} \left[(4D_3 u_{\bar{\theta}}^2 + 3D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}) \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} + (D_3 u_{\bar{\theta}}^3 + D_4 v_0 u_{\bar{\theta}}^2) \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\perp} \partial q_{\bar{\theta}}} \right] = (\mathbf{B}_{A-D})_{\perp},
\end{aligned}$$

la versión fenomenológica es

$$\begin{aligned}
& \partial_t \mathbf{u} + \lambda_1 (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \lambda_2 (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + \lambda_3 \nabla (|\mathbf{u}|^2) \\
& = \alpha \mathbf{u} - \beta |\mathbf{u}|^2 \mathbf{u} - \nabla P + D_B \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + D_T \nabla^2 \mathbf{u} + D_2 (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{f}
\end{aligned} \tag{8.2}$$

donde

$$P(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n (\rho - \rho_0)^n \tag{8.3}$$

que en el sistema de coordenadas $(q_{\bar{\theta}}, q_{\perp})$ tiene las componentes

$$\begin{aligned}
 \hat{e}_{\bar{\theta}} : \quad & \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t} + (\lambda_1 + \lambda_2 + 2\lambda_3) u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} = \alpha u_{\bar{\theta}} - \beta u_{\bar{\theta}}^3 - \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n n (\rho - \rho_0)^{n-1} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} + D_B \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \\
 & + D_T \left(\frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} + \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}^2} \right) + D_2 u_{\bar{\theta}} \left(\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \right)^2 + D_2 u_{\bar{\theta}}^2 \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2} \\
 \hat{e}_{\perp} : \quad & 2\lambda_3 u_{\bar{\theta}} \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}} = - \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n n (\rho - \rho_0)^{n-1} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} + D_B \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}} q_{\perp}}
 \end{aligned} \tag{8.4}$$

Ambas ecuaciones contienen: la derivada local $\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial t}$, que representa la variación de $u_{\bar{\theta}}$ en un punto fijo del espacio; a diferencia de la ecuación obtenida del modelo cinético la expresión fenomenológica contiene términos lineales y cúbicos en u_A , que no son cero en el caso estacionario y homogéneo, y de los cuales se puede obtener la velocidad que tienen las bacterias en el caso ordenado, como función de los parámetros α y β , para más detalle consultar la sección 3.2; ambas contienen los términos convectivos $\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}}, \frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}}$ asociados al cambio de posición de la partícula fluida; así como los términos $\frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}^2}, \frac{\partial^2 u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\perp}^2}$ son de difusión; los términos que contienen $\frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}}, \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}}$ son consecuencia de la presión del sistema, que se ve más claramente en la primera de las expresiones (8.3).

Cada término tiene un coeficiente que depende de las propiedades microscópicas del problema: v_0 , velocidad de cada bacteria; el parámetro λ probabilidad por unidad de tiempo de que cualquier partícula cambie su dirección; t del parámetro Λ , que proviene de una integral que está pendiente.

La principal diferencia entre las dos ecuaciones del ímpetu, es que la obtenida del modelo cinético no sólo contiene las derivadas $\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}}, \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}}$ sino términos cruzados $\frac{\partial u_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}}$ y segundas derivadas $\frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}^2}, \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_{\perp}^2}$.

8.1. Conclusiones

En el modelo de gases, el teorema H proporciona una manera de obtener la solución de la ecuación de Boltzmann para un estado de equilibrio termodinámico del sistema. Porque resultan tres invariantes colisionales ($m, m\mathbf{v}, \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2$), y por lo tanto tres ecuaciones de conservación macroscópicas; en el caso de bacterias, se conserva solamente la densidad (ecuación de Continuidad), para el momento lineal obtuvimos una ecuación de balance. No se puede utilizar el teorema H, porque no existen los invariantes colisionales suficientes, que como una combinación lineal den la estructura de la solución. Aplicamos el modelo de Máxima Entropía para obtener una función de distribución que cumpliera con la información (definición de variables macroscópicas) conocida sobre el sistema. Tomando como referencia esta solución desarrollamos la función de distribución de acuerdo con el método de Chapman-Enskog. Dependiendo del orden en que se trunque el desarrollo se recuperan diferentes conjuntos de ecuaciones hidrodinámicas, en este trabajo nos limitamos al desarrollo de los dos primeros: a orden cero, ecuaciones de Euler, a orden uno, ecuaciones de Navier-Stokes. La validez de cada una de estas expresiones se puede asociar con el número de Reynolds al considerar si el fluido tiene o no viscosidad, la ecuación de Euler describe el flujo con viscosidad muy pequeña o nula, situación que se refleja en un número de Reynolds grande, mientras que la ecuación de Navier-Stokes representa el caso en el que hay viscosidad y por lo tanto el flujo tiene asociado un

número de Reynolds pequeño. En el caso del movimiento bacteriano se ha visto que el ambiente que experimentan se refleja en número de Reynolds pequeño, del orden de 10^{-5} , por lo tanto la ecuación de movimiento de Navier-Stokes es la ecuación más indicada para su descripción. Ésta tiene la estructura de las ecuaciones obtenidas en otros modelos. Los coeficientes involucrados en estas ecuaciones están dados en términos de parámetros microscópicos del sistema (v_0, λ) , a diferencia de otros modelos propuestos.

8.2. Perspectivas

Como ya se ha mencionado, el parámetro Λ se definió por el cálculo de una integral que esta pendiente. El resultado de está puede producir un parámetro que no sea constante y que incluya explícitamente las características del ruido η , como el ancho de su distribución (σ).

Como siguiente paso en el desarrollo de este modelo, debe incluirse el término de colisión ($I_{Colisión}$), descartado en este trabajo y que nos permitió realizar una primera descripción del sistema. Dicho término es importante, ya que como sabemos las colisiones son las que producen que las bacterias en cierto instante se desplacen en cierta dirección.

Una opción interesante, es la aplicación de la teoría cinética al movimiento de motores moleculares, éstos también presentan un movimiento organizado. Los motores moleculares son proteínas que transportan diversas sustancias y vesículas dentro de las células eucariotas.

9

Apéndices

9.1. Cuadros de constantes

Constantes que se definieron en la sección 7.1

Constantes	Valor
c_1 (Ajuste de λ)	0.4461
c_2 (")	0.6283
c_3 (Ajuste de \mathbf{u})	0.3545
c_4 (")	0.0915
$A_1 = \frac{1}{c_3}$	2.8207
$A_2 = -\frac{c_4}{c_3}$	-0.2580
$B_1 = c_1 A_1$	1.2585
$B_2 = c_1 A_2 + A_2$	0.5132
$D = e^{-1-B_2}$	0.2202

Cuadro 9.1: Constantes adimensionales.

Constantes introducidas por cálculos realizados en la sección 7.2:

Constantes	Valor
e_1 (Ajuste de p_1)	-2.847
e_2 (")	2.3891
$E_1 = De_1A_1$	-1.7683
$E_2 = De_1A_2 + De_2$	0.6878
e_3 (Ajuste de p_2)	-0.4177
e_4 (")	2.4445
$E_3 = De_3A_1$	-.2594
$E_4 = De_3A_2 + De_4$	0.5620
d_1 (Ajuste de f_1)	4.0823
d_2 (")	3.4237
d_3 (Ajuste de f_2)	0.4597
d_4 (")	3.463
$D_1 = -Dd_1A_1$	2.5356
$D_2 = Dd_1A_2 + Dd_2$	-0.5220
$D_3 = -Dd_3A_1$	-0.2855
$D_4 = Dd_3A_2 + Dd_4$	-0.7364
d_5 (Ajuste de P_3)	3.2047
d_6 (")	6.4376
$E_5 = Dd_5A_1$	1.9905
$E_6 = Dd_5A_2 + Dd_6$	1.2355

Cuadro 9.2: Constantes adimensionales.

9.2. Cálculo de la divergencia de un tensor.

La divergencia de un tensor formado de los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} es

$$\nabla \cdot (\mathbf{ab}) = (\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b} + \mathbf{b}(\nabla \cdot \mathbf{a}),$$

cuando el tensor está multiplicado por una función

$$\nabla \cdot (f\mathbf{ab}) = f\nabla \cdot (\mathbf{ab}) + \mathbf{ab} \cdot \nabla f = f[(\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b} + \mathbf{b}(\nabla \cdot \mathbf{a})] + \mathbf{ab} \cdot \nabla f, \quad (9.1)$$

Para aplicar el desarrollo anterior en el cálculo de la divergencia del tensor $\underline{P}_{(l)}$ (7.48)

$$\nabla \cdot \underline{P}_{(l)} = \nabla \cdot (\rho p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}\hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}) + \nabla \cdot (\rho p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp}\hat{\mathbf{e}}_{\perp})$$

identificamos como

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, t) &= \rho(\mathbf{r}, t) \quad , \quad \nabla = \frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}}\hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp}}\hat{\mathbf{e}}_{\perp}, \\ \mathbf{a}_1 &= p_1\hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \quad , \quad \mathbf{b}_1 = \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\ \mathbf{a}_2 &= p_2\hat{\mathbf{e}}_{\perp} \quad , \quad \mathbf{b}_2 = \hat{\mathbf{e}}_{\perp}, \end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\rho p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}) &= \nabla \cdot (f \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1) = f (\mathbf{a}_1 \cdot \nabla) \mathbf{b}_1 + f \mathbf{b}_1 (\nabla \cdot \mathbf{a}_1) + \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1 \cdot \nabla f \\ \nabla \cdot (\rho p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}) &= \nabla \cdot (f \mathbf{a}_2 \mathbf{b}_2) = f (\mathbf{a}_2 \cdot \nabla) \mathbf{b}_2 + f \mathbf{b}_2 (\nabla \cdot \mathbf{a}_2) + \mathbf{a}_2 \mathbf{b}_2 \cdot \nabla f\end{aligned}\quad (9.2)$$

el desarrollo de cada término es

$$\begin{aligned}f (\mathbf{a}_1 \cdot \nabla) \mathbf{b}_1 &= \rho \left[p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \right) \right] \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} = \rho p_1 \frac{\partial \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}}{\partial q_{\bar{\theta}}} = 0 \\ f \mathbf{b}_1 (\nabla \cdot \mathbf{a}_1) &= \rho \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \left[\left(\frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \right) \cdot p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \right] = \rho \frac{\partial p_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} = \begin{pmatrix} \rho \frac{\partial p_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1 &= \begin{pmatrix} p_1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1 \cdot \nabla f &= \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (9.3)$$

$$\begin{aligned}f (\mathbf{a}_2 \cdot \nabla) \mathbf{b}_2 &= \rho \left[p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \right) \right] \hat{\mathbf{e}}_{\perp} = \rho p_2 \frac{\partial \hat{\mathbf{e}}_{\perp}}{\partial q_{\perp}} = 0 \\ f \mathbf{b}_2 (\nabla \cdot \mathbf{a}_2) &= \rho \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \left[\left(\frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \right) \cdot p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \right] = \rho \frac{\partial p_2}{\partial q_{\perp}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho \frac{\partial p_2}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix} \\ \mathbf{a}_2 \mathbf{b}_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ p_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix}, \quad \Rightarrow \mathbf{a}_2 \mathbf{b}_2 \cdot \nabla f = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ p_2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (9.4)$$

$$\Rightarrow \nabla \cdot (\rho p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}) = \begin{pmatrix} \rho \frac{\partial p_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + p_1 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla \cdot (\rho p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho \frac{\partial p_2}{\partial q_{\perp}} + p_2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix}\quad (9.5)$$

finalmente

$$\nabla \cdot \underline{P}_{(l)}(\mathbf{r}, t) = v_0^2 D \nabla \cdot (\rho p_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}) + v_0^2 D \nabla \cdot (\rho p_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}) = v_0^2 D \begin{pmatrix} \rho \frac{\partial p_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + p_1 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ \rho \frac{\partial p_2}{\partial q_{\perp}} + p_2 \frac{\partial \rho}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix}\quad (9.6)$$

El vector que resulta de la divergencia del tensor de presión a orden uno (7.61)

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \underline{P}^{(1)} &= \nabla \cdot \left[-\frac{D v_0}{\Lambda} F f_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} - \frac{D v_0}{\Lambda} F f_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \right] \\ &= -\frac{D v_0}{\Lambda} [\nabla \cdot (F f_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}) + \nabla \cdot (F f_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp})]\end{aligned}$$

se obtiene definiendo las siguientes funciones

$$\begin{aligned}f(\mathbf{r}, t) &= F(\mathbf{r}, t), \quad \nabla = \frac{\partial}{\partial q_{\bar{\theta}}} \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} + \frac{\partial}{\partial q_{\perp}} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}, \\ \mathbf{a}_1 &= f_1 \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}}, \quad \mathbf{b}_1 = \hat{\mathbf{e}}_{\bar{\theta}} \\ \mathbf{a}_2 &= f_2 \hat{\mathbf{e}}_{\perp}, \quad \mathbf{b}_2 = \hat{\mathbf{e}}_{\perp}\end{aligned}$$

para aplicar la expresión (9.1) de la sección anterior

$$\nabla \cdot \underline{P}^{(1)}(\mathbf{r}, t) = -\frac{D v_0}{\Lambda} \begin{pmatrix} F \frac{\partial f_1}{\partial q_{\bar{\theta}}} + f_1 \frac{\partial F}{\partial q_{\bar{\theta}}} \\ F \frac{\partial f_2}{\partial q_{\perp}} + f_2 \frac{\partial F}{\partial q_{\perp}} \end{pmatrix} \quad (9.7)$$

Bibliografía

- [1] E. Bertin, M. Droz y G. Grégoire (2006) Boltzmann and hydrodynamic description for self-propelled particles. *Phys. Rev. E.* **74**, 022101,1-4.
- [2] W. F. Hughes y J. A. Brighton (1970) *Teoría y problemas de Dinámica de Fluidos*. Editorial McGraw-Hill México, Serie de compendios Schaum.
- [3] Transporte de masa, momento y energía.
- [4] L. García-Colín, P. Goldstein y J. L. del Río (2007), Ludwig Boltzmann a cien años de su muerte. El Colegio Nacional, México D. F.
- [5] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen y O. Shochet (1995), Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1226.
- [6] J. Toner, Y. Tu y S. Ramaswamy (2005), Hydrodynamics and phases of flocks. *Annals of Physics* **318** 170-244.
- [7] Z. Csehók y A. Czirók (1997), *Physica A* **243**, 304.
- [8] I. Prigogine y R. Herman (1971), *Kinetic theory of vehicular traffic*. Elsevier.
- [9] D. Helbing (2001), Traffic and related self-driven many-particle systems. *Revs. Mod. Phys.* **73** 1067-1141.
- [10] S. L. Paveri-Fontana (1975), On Boltzmann-like treatments for traffic flow: a critical review of the basic model and an alternative proposal for dilute traffic analysis. *Transp. Res.* **9** 225-235.
- [11] H. M. Jaeger, S. R. Nagel y R. P. Behringer (1996), The physics of granular materials. *Physics Today*, April, 32-38.
- [12] I. Goldhirsch (2003) Rapid granular flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **35** 267-293.
- [13] N. V. Brilliantov y T. Pöschel (2004). *Kinetic theory of granular gases*. Oxford.
- [14] C. Cercignani y G. M. Kremer (2002), *The Relativistic Boltzmann Equation: Theory and Applications*. Progress in Mathematical Physics vol. 22 Birkhäuser Verlag, Basel Boston Berlin.
- [15] R. Balesc (1988), *Transport processes in plasmas*. North-Holland.
- [16] B. Düring y G. Toscani (2007), *Physica A* **384**, 493-506.
- [17] P. L. Carpenter (1969) *Microbiología*. Segunda Edición. Editorial Interamericana, México, D.F.

- [18] B. González-Pedrajo y G. Dreyfus (1999) Motilidad, biogénesis flagelar y quimiotaxis bacteriana. Boletín de Educación Bioquímica (BEB) 99, Vol. 18. Num. 4 pp. 142-152.
- [19] T. D. Brock, D. W. Smith y M. T. Madigan (1994). Microbiología. Cuarta Edición. Prentice Hall Hispanoamericana. Estado de México, México.
- [20] G. Dreyfus (1991) El mundo de los microbios. La ciencia desde México, Vol. 43, Fondo de Cultura Económica, México, D. F.
- [21] T. D. Brock (1978) Biología de los microorganismos. Segunda Edición, Ediciones Omega, Barcelona.
- [22] H. C. Berg (2004). E. coli in motion. Springer-Verlag New York, Inc.
- [23] H. C. Berg (1993). Random walks in biology. Princeton University Press.
- [24] W. Mingming, J. W. Roberts, S. Kim, D. L. Koch y M. DeLisa (2006), Collective Bacterial Dynamics Revealed Using a Three-Dimensional Population-Scale Defocused Particle Tracking Technique. Am. Soc. Microbiol. p. 4987-4994.
- [25] A. Czirók y T. Vicsek (1999), Collective Motion. 1-11.
- [26] N. Shimoyama, K. Sugawara, T. Mizuguchi, Y. Hayakawa y M. Sano (1996), Collective Motion in a System of Motile Elements. Phys. Rev. Lett. **76**, 3870.
- [27] G. Grégoire y H. Chaté (2004), Phys. Rev. Lett. **92**. 025702
- [28] A. Czirók, H. Stanley y T. Vicsek (1997). Onset of collection and cohesive motion. J. Phys. A **30**, 1375.
- [29] E. M. Purcell (1977), Life at low Reynolds number. American Journal of Physics **45**, No. 1.
- [30] N. Bellomo, Modeling complex living systems: A kinetic theory and stochastic game approach. Birkhäuser Boston, 2008.
- [31] A. Bellouquid y M. Delitala (2005), Mathematical methods and tools of kinetic theory towards modelling complex biological systems. World Scientific Publishing Company **15**, No. 11, 1639-1666.
- [32] D. Helbing, I. Farkas and T. Vicsek, Nature (London) **407**, 487 (2000); Phys. Rev. Lett. **84**, 1240 (2000).
- [33] J. K. Parrish and W. M. Hamner (1997). Three Dimensional Animals Groups. Cambridge University Press, Cambridge, England.
- [34] F. Nédélec, T. Surrey, A. C. Maggs and S. Leibler (1997), Nature (London) **389**, 305 . Y. Harada, A. Noguchi, A. Kishino and T. Yanagida, Nature (London) **326**, 805 (1987).
- [35] J. T. Bonner, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **95**, 9355 (1998); M. T. Laub and W. F. Loomis, Mol. Biol. Cell **9**, 3521(1998).
- [36] Y. Tu, J. Toner and M. Ulm, Phys. Rev. Lett. **80**, 4819 (1998). B. L. Partridge, Sci. Am. **246**, No. 6, 114-123 (1982).

- [37] R. Guerrero y M. Berlanga (), Movimiento procariótico: entre la atracción y la repulsión en los balbuceos de la vida. *Actualidad SEM*, **40**, 18-26.
- [38] P. Nelson (2005). *Física biológica, Energía, información, vida*. Editorial Reverté.
- [39] R. M. Macnab (1996) Flagella and motility. En: *Escherichia coli* and *Salmonella typhimurium*: cellular and molecular biology. 2nd Ed. Am. Soc. Microbiol, Washington, DC. USA, pp. 123-145.
- [40] L. García-Colín y P. Goldstein (2003) *La física de los procesos irreversibles*. Tomo I. El Colegio Nacional. México, D. F.
- [41] L. García-Colín (1990) *Teoría cinética de los gases*. Universidad Autónoma Metropolitana, Colección CBI. México, D. F.
- [42] L. García-Colín (2003) *Y sin embargo se mueven... Teoría cinética de la materia*. Fondo de Cultura Económica, México, D. F.
- [43] R. M. Velasco y L. Romero-Salazar y M. Mayorga (2000), The maximum entropy formalism in Kinetic Theory. *Res. Trends Stat. Phys.* **3**, 87-103.
- [44] L. García-Colín (1990), *Termodinámica de Procesos Irreversibles*. Universidad Autónoma Metropolitana, México.
- [45] R. M. Velasco (1993), *Teoría cinética de gases*. Universidad Autónoma Metropolitana.
- [46] F. John, J. M. Marsden y L. Sirovich (1988). *The Boltzmann equation and its applications*. Vol. 67. Springer-Verlag.
- [47] H. Struchtrup, *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Flows*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005.
- [48] S. Chapman y T. G. Cowling (1970) *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Third Edition. Cambridge University Press, Cambridge.
- [49] C. Cercignani (1969) *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. Plenum Press.
- [50] T. I. Gombosi (1994). *Gas kinetic theory*. Cambridge University Press.
- [51] H. C. Berg (1993) *Random Walks in Biology*. Princeton University Press, USA.
- [52] Berg H. C. (2004) *E. Coli in motion*. Springer, USA.
- [53] I. S. Gradshteyn y I. M. Ryzhik (2007). *Table of integrals, series and products*. Seventh Edition. Elsevier, USA.
- [54] G. B. Arfken y H. J. Weber (1985), *Mathematical Methods for Physicists*. Third Edition. Academic Press, Inc. 1985.
- [55] Razon Aurea. CICESE Estudiantes, junio del 2009.
- [56] Grupo de física computacional. INIFTA. CONICET UNLP Facultad de Ciencias Exactas Departamento de Química.

-
- [57] P. L. Hartzell y P. Youderain (1995), Genetics of gliding motility and development in *Myxococcus xanthus*. Arch. Microbiol. **164**:309-323.
- [58] R. M. Macnab (1996) Flagella and motility. En: Escherichia coli and Salmonella typhimurium: cellular and molecular biology, 2nd ed. Am. Soc. Microbiol., Washington, DC. USA, pp. 123-145.
- [59] D. F. Blair y S. K. Dutcher (1992) Flagella in prokaryotes and lower eukaryotes. Curr Opin Genet Develop **2**:756-767.
- [60] K. Namba y F. Vonderviszt (1997) Molecular architecture of bacterial flagellum. Quart Rev. Biophys **30**:1-65.
- [61] D. F. Blair (1995) How bacteria sense and swim. Annu. Rev. Microbiol. **49**:489-522.
- [62] N. R. Francis, G. E. Sosinsky, D. Thomas y D. J. DeRosier (1994) Isolation, characterization and structure of bacterial flagellar motors containing the switch complex. J. Mol. Biol. **235**:1261-1270.
- [63] A. Czirók, M. Matsushita and T. Vicsek, Phys. Rev. E, **63**, 031915 (2001).



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
UNIDAD IZTAPALAPA
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

Para obtener el grado de
Maestría en Ciencias (Física)

***Aplicación de la Ecuación de Boltzmann
a bacterias con flagelos.***

Tesis que presenta

Fis. Rosa María Milián Morales.

Asesores:

Dra. Rosa María Velasco Belmont.

Dr. Leonardo Dagdug Lima.

Mexico, D. F., 30 de junio de 2010.