



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA QUÍMICA – PROCESOS

**DIFUSIÓN AMORTIGUADA DE MASA Y ENERGÍA EN MEDIOS
ANISOTRÓPICOS**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:

M.I. RENE MOISÉS HERNÁNDEZ GONZÁLEZ

TUTOR PRINCIPAL:

DR. ÁNGEL ENRIQUE CHÁVEZ CASTELLANOS – FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM

COMITÉ TUTOR:

DR. RAFAEL HERRERA NÁJERA – FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM
DR. EDUARDO RINCÓN AGUILAR – FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM
EN INGENIERÍA

MÉXICO, D. F. OCTUBRE 2014



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: DR. MANERO BRITO OCTAVIO
Secretario: DR. AGUAYO VALLEJO JUAN PABLO
Vocal: DR. SOLORIO ORDAZ FRANCISCO JAVIER
1^{er.} Suplente: DR. SALINAS VÁZQUEZ MARTÍN
2^{d o.} Suplente: DR. CHÁVEZ CASTELLANOS ÁNGEL ENRIQUE

LUGAR DONDE SE REALIZÓ LA TESIS:

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
FACULTAD DE QUÍMICA, EDIFICIO E
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

TUTOR DE TESIS:

DR. ÁNGEL ENRIQUE CHÁVEZ CASTELLANOS

FIRMA

AGRADECIMIENTOS:

**A MI MADRE POR SER UN EJEMPLO DE DISCIPLINA Y DETERMINACIÓN.
GRACIAS MA.**

A TODOS MIS HERMANOS QUE ME ENSEÑARON VALORES.

**AL DOCTOR ÁNGEL ENRIQUE CHÁVEZ CASTELLANOS POR DIRIGIR ESTE
TRABAJO, POR SU CONFIANZA Y APOYO EN TODO MOMENTO.**

**A LA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO QUE HA SIDO UNA
CASA PARA MÍ DESDE LA PREPA 8 HASTA CU.**

**AL CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA (CONACYT) POR LA
BECA OTORGADA PARA LA REALIZACIÓN DE ESTE TRABAJO.**

A MIS COMPAÑEROS DE ESTE CAMINO, ELLOS SABEN QUIENES SON.

**Y FINALMENTE A LA VIDA PORQUE ENCONTRÉ UN OFICIO QUE PUEDO
DESARROLLAR CON ALEGRÍA.**

ÍNDICE GENERAL

	Pág.
ÍNDICE DE FIGURAS	ii
PREFACIO	v
1.-INTRODUCCIÓN	1
1.1.-ANTECEDENTES	1
1.2.-APLICACIONES DE LA ECUACIÓN DE CATTANEO	5
2.-RESULTADOS PRELIMINARES	8
2.1.-DIFUSIÓN DE ENERGÍA UNIDIMENSIONAL EN UN SÓLIDO HOMOGÉNEO FINITO (PARADOJA DE TAITEL)	8
2.2.-DIFUSIÓN DE ENERGÍA BIDIMENSIONAL EN UN SÓLIDO ORTOTRÓPICO FINITO	14
3.-ONDAS TÉRMICAS EN UN MEDIO ORTOTRÓPICO GENERADAS POR CALENTAMIENTO CON LÁSER	21
3.1.-INTRODUCCIÓN	21
3.2.-MODELO MATEMÁTICO Y ESQUEMA NUMÉRICO	22
3.3.-EFECTO DEL TIEMPO DE RELAJAMIENTO (Λ)	29
3.4.-EFECTO DE LA ANISOTROPÍA DEL MATERIAL (R , RELACIÓN DE CONDUCTIVIDADES TÉRMICAS)	32
4.-MODELO HIPERBÓLICO PARA EL MOVIMIENTO DE UNA POBLACIÓN DE BACTERIAS EN UN MEDIO POROSO ORTOTRÓPICO BIDIMENSIONAL	36
4.1.-INTRODUCCIÓN	36
4.2.-MODELO MATEMÁTICO Y SOLUCIÓN	38
4.3.-CASO LÍMITE $a \gg p$	42
4.4.-CASO LÍMITE $a \ll p$	47
4.5.-SISTEMA BIDIMENSIONAL	50
5.-CONCLUSIONES	59
BIBLIOGRAFÍA	61
APÉNDICE	66
ARTÍCULO PUBLICADO	70

ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Distribuciones de temperatura con $\alpha=1 \text{ cm}^2/\text{h}$, ecuación (6).	3
Figura 2. Distribuciones de temperatura adimensional, $(1-\theta)$ para $\eta=0.2$, $\Lambda=0$ (Fourier) y $\Lambda=1$ (Cattaneo).	11
Figura 3. Distribuciones de temperatura adimensional, $(1-\theta)$ para $\eta=0.7$, $\Lambda=0$ (Fourier) y $\Lambda=1$ (Cattaneo).	12
Figura 4. Temperatura adimensional, $(1-\theta)$ para $\xi=0.25$, $\Lambda=0$ (Fourier) y $\Lambda=1$ (Cattaneo).	13
Figura 5. Distribuciones de flux de energía adimensional, χ , para $\eta=0.7$ y $\Lambda=1$.	14
Figura 6. Distribuciones de rapidez de generación de entropía adimensional para $\Lambda=1$ y $\eta=0.7$.	15
Figura 7. Distribución de temperatura adimensional $(1-\theta)$ para $\Lambda=0$ (Fourier) y diferentes condiciones. a) $\eta=0.05$ y $R_{yy}=0.1$. b) $\eta=0.05$ y $R_{yy}=1$. c) $\eta=0.01$ $R_{yy}=10$.	19
Figura 8. Distribución de temperatura adimensional $(1-\theta)$ para $\Lambda=0.024$, $\eta=0.05$ y diferentes valores del parámetro R_{yy} . a) $R_{yy}=0.1$. b) $R_{yy}=1$. c) $R_{yy}=2$.	20
Figura 9. Sistema coordenado.	22
Figura 10. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=1$, $\eta=0.5, 1.0, 1.5, 2.0$. Línea continua: solución analítica, • : solución numérica.	28
Figura 11. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=10$, $\eta=0.5, 1.0, 1.5, 2.0$. Línea continua: solución analítica, • : solución numérica.	28
Figura 12. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=1$, $R=1$, $\eta=0.2, 0.4$ y 0.6 .	30
Figura 13. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=0.1$, $a=1$, $b=1$, $R=1$, $\eta=0.2, 0.4$ y 0.6 .	31
Figura 14. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ)	

para $\Lambda=1, a=1, b=1, R=0.1, \eta=0.2, 0.4$ y 0.6 .	33
Figura 15. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1, a=1, b=1, R=5, \eta=0.2, 0.4$ y 0.6 .	34
Figura 16. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1, a=1, b=10, R=1, \eta=0.2, 0.4$ y 0.6 .	35
Figura 17. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \gg p$ (experimento 1) y diferentes valores del parámetro q . (a) $q=0.001$. (b) $q=0.01$. (c) $q=0.1$. (d) $q=1$.	44
Figura 18. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \gg p$ (experimento 2), $b_0 = 1-H(x-0.1)$, y diferentes valores del parámetro q . (a) $q=0.001$. (b) $q=0.01$. (c) $q=0.1$.	45
Figura 19. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \gg p$ (experimento 2), $b_0 = 1-H(x-0.05)$, y diferentes valores del parámetro q . (a) $q=0.001$. (b) $q=0.01$. (c) $q=0.1$.	46
Figura 20. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \ll p$ (experimento 2), $b_0 = 1-H(x-0.1)$, $a_0(x) = 1$, y diferentes valores del parámetro q . (a) $q=0.001$. (b) $q=0.01$. (c) $q=0.1$.	48
Figura 21. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \ll p$ (experimento 2), $b_0 = 1-H(x-0.1)$, $q=0.01$, y diferentes perfiles iniciales de concentración de nutriente. (a) $a_0(x)=x/(10-9x)$. (b) $a_0(x)=x$. (c) $a_0(x)=1-\exp/(-5x)$.	49
Figura 22. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \ll p$ (experimento 2), $b_0 = 1-H(x-0.1)$, $q=0.01, t=0.02$ y diferentes perfiles iniciales de concentración de nutriente.	50
Figura 23. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (121)), $q=0.01, h=1$ (medio isotrópico) y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.015$. (b) $t=0.030$. (c) $t=0.045$. (d) $t=0.060$.	53
Figura 24. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (121)), $q=0.01, h=0.1$ y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.015$. (b) $t=0.030$.	

(c) $t=0.045$. (d) $t=0.060$. 54

Figura 25. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (121)), $q=0.01$, $h=5$ y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.007$. (b) $t=0.014$.

(c) $t=0.021$. (d) $t=0.028$. 55

Figura 26. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (124)), $q=0.017$, $h=1$ (medio isotrópico) y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.02$.

(b) $t=0.03$. (c) $t=0.04$. 57

Figura 27. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (124)), $q=0.017$, $h=0.1$ (medio anisotrópico) y diferentes tiempos adimensionales.

(a) $t=0.03$. (b) $t=0.04$. (c) $t=0.05$. 58

PREFACIO

El objetivo principal de este trabajo consiste en plantear, resolver y analizar el flujo de energía y masa en sistemas de reacción-difusión con relajamiento en un medio anisotrópico. Fueron seleccionados dos sistemas de interés práctico, identificados por la diferencia de la escala característica de tiempo en la cual se desarrollan (picosegundos-días), considerando un esquema matemático equivalente. El primer sistema trata del transporte de energía en un medio sometido a la irradiación de un láser, con aplicaciones biomédicas y en procesamiento de materiales. El segundo sistema describe el flujo de una población de bacterias a través de un medio anisotrópico, utilizado en procesos de biorremediación de suelos contaminados.

Objetivos particulares:

Plantear la ecuación de Cattaneo en los sistemas de estudio propuestos introduciendo los efectos de anisotropía del medio y de un término de generación.

Obtener distribuciones transitorias de temperatura y concentración a partir de la solución de las ecuaciones de variación correspondientes.

Evaluar el efecto del tiempo de relajamiento y de la anisotropía del medio en las distribuciones obtenidas.

Originalidad:

El sistema propuesto para el caso de la conducción de energía ha sido analizado en la literatura para un medio anisotrópico (sólido ortotrópico) sin términos fuente; en este proyecto se extenderá el análisis de un problema similar incluyendo un término de generación dependiente del espacio. En el caso del sistema propuesto para el estudio de la difusión de masa con relajamiento, se generalizará para un medio ortotrópico y se evaluará el efecto del tipo de generación que describe el crecimiento de una población de bacterias.

1.-INTRODUCCIÓN

1.1.-ANTECEDENTES

La primera teoría desarrollada sobre procesos irreversibles fue establecida durante los años de 1941 a 1945 por Meixner, Prigogine y Casimir, basados en las ideas introducidas por de Donder y Önsager apenas una década atrás [1]-[3]. A la teoría antes mencionada se le conoció posteriormente como “Termodinámica irreversible lineal” (TIL). La TIL se basa en cuatro hipótesis fundamentales: la hipótesis del equilibrio local, la extensión de la segunda ley de la termodinámica a los procesos fuera del equilibrio, la relación lineal entre los fluxes y las fuerzas termodinámicas (gradientes de variables intensivas locales) y el llamado principio de reciprocidad de Önsager.

Las hipótesis que soportan la teoría termodinámica también definen sus límites de aplicación. Una gran cantidad de procesos irreversibles pueden ser descritos dentro del marco general de la TIL encontrando aplicaciones en diferentes campos de las ciencias y la ingeniería. En particular, en el campo de la ingeniería la mayor parte de los procesos irreversibles están descritos por relaciones fenomenológicas lineales entre los fluxes y las fuerzas termodinámicas. La ley de Fick de la difusión de masa, la ley de Fourier de la conducción de energía y la ley de Ohm de la conducción de carga eléctrica son ejemplos de ecuaciones constitutivas lineales. Sin embargo, al combinar una relación fenomenológica lineal con su ecuación de conservación correspondiente se obtiene una ecuación diferencial que predice una velocidad de propagación infinita para las perturbaciones que se transmiten en un medio, como ejemplo se presenta la ley de Fourier de la conducción de energía:

$$\mathbf{q} = -k\nabla T \quad (1)$$

En donde \mathbf{q} es el flux de energía, k es la conductividad térmica y T la temperatura. Para un medio sólido con propiedades físicas constantes el balance de energía es:

$$\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0 \quad (2)$$

En la expresión anterior ρ es la densidad y C_v es la capacidad calorífica a volumen constante. Al combinar la ley de Fourier con la ecuación de conservación de energía para un medio conductor rígido se obtiene la ecuación de difusión de energía:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T \quad (3)$$

con $\alpha = k/(\rho C_v)$ como el coeficiente de difusión térmica. Se podría considerar también la difusión de masa y la respectiva primera ley de Fick.

Para mostrar la naturaleza de las soluciones de la ecuación (3) se considera la difusión de energía en un medio infinito definida mediante la siguiente condición inicial:

$$T(x, 0) = T_0 \delta(x) \quad (4)$$

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x = 0 \\ 0 & \text{si } x \neq 0 \end{cases} \quad (5)$$

La solución fundamental de las ecuaciones (3) y (4) está dada por:

$$T(x, t) = \frac{T_0}{2\sqrt{\pi\alpha t}} \exp\left(\frac{-x^2}{4\alpha t}\right) \quad (6)$$

El término exponencial en la ecuación (6) indica que el medio infinito se encuentra perturbado en forma completa para cualquier $t > 0$, lo anterior implica que la velocidad de propagación de la perturbación térmica es infinita. La expresión anterior incluye un factor de longitud implícito (unidades de la variable x) para conservar la consistencia dimensional.

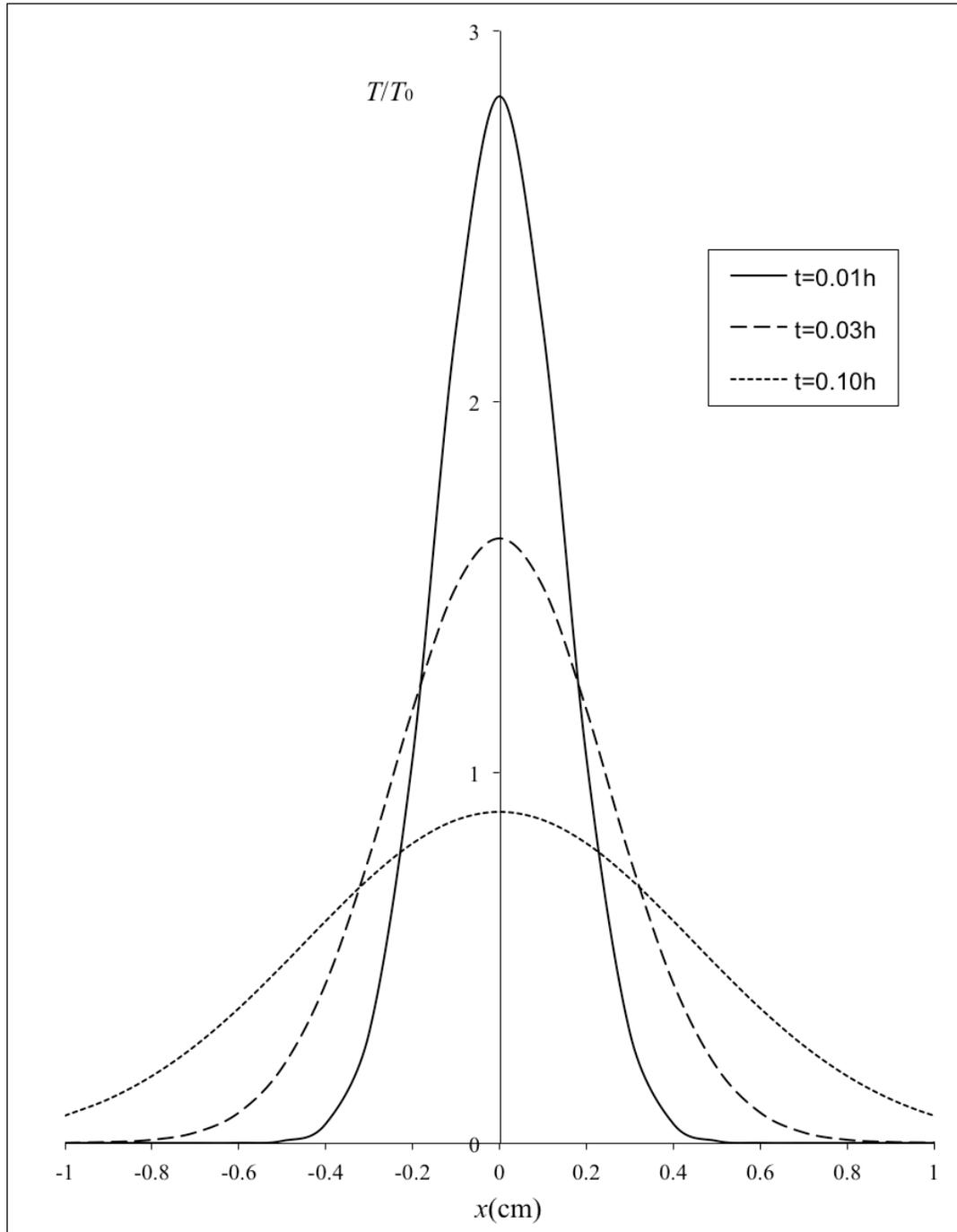


Figura1. Distribuciones de temperatura con $\alpha=1 \text{ cm}^2/\text{h}$, ecuación (6).

En 1958 Cattaneo y Vernotte en forma independiente propusieron la siguiente ecuación para corregir la deficiencia de la ecuación (1) [4]-[7]:

$$\mathbf{q} + \tau \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -k \nabla T \quad (7)$$

en donde τ es un tiempo de relajamiento característico del sistema y se puede interpretar como el tiempo que tarda el flux de energía en generarse como consecuencia de un gradiente de temperatura. Sustituyendo la ecuación (7) en la ecuación (2) se obtiene:

$$\tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T \quad (8)$$

La ecuación (8) establece una velocidad de propagación finita para las perturbaciones térmicas que se propagan en un medio, esta velocidad está dada por $C = (\alpha/\tau)^{1/2}$. La introducción de la ecuación de Cattaneo-Vernotte produce una ecuación diferencial parcial hiperbólica para la temperatura, por este motivo se encuentra en la literatura el término conducción de energía hiperbólica para referirse a los procesos de transporte de energía descritos por la ecuación (7). Procediendo de forma similar se puede postular una ecuación análoga para el transporte de masa con velocidad de propagación finita.

Las ecuaciones de transporte con velocidad de propagación finita se encuentran fundamentadas desde un punto de vista físico y aunque escasa, también por evidencia experimental. Sin embargo, cuando se consideran las consecuencias de la ecuación (7) desde un punto de vista termodinámico se pueden presentar diferentes problemas. Si se analiza la ecuación (7) en el marco de la termodinámica irreversible lineal, la cual está basada en la hipótesis del equilibrio local, se obtiene una expresión para la rapidez de generación de entropía que admite valores positivos y negativos. De esta forma, al hacer uso de las ecuaciones de transporte con velocidad de propagación finita es necesario verificar su consistencia termodinámica [8]-[10].

1.2.-APLICACIONES DE LA ECUACIÓN DE CATTANEO

Los orígenes de las ecuaciones de transporte con velocidad de propagación finita pueden encontrarse desde el trabajo de Maxwell sobre la teoría cinética de los gases (1867), el trabajo de Morse y Feshbach (1953), Cattaneo (1958) y Vernotte (1958). Posteriormente el desarrollo de la teoría de la difusión con velocidad de propagación finita se ha realizado desde diferentes campos de la física entre los cuales se encuentran: Mecánica Estadística, Mecánica Cuántica, Termodinámica de Procesos Irreversibles y teoría de Procesos de Recorrido Aleatorio. Sin embargo, el desarrollo de las aplicaciones directas de la teoría y su confirmación experimental han sido escasos debido fundamentalmente a limitaciones tecnológicas. En el caso de la conducción de energía los principales problemas que se encuentran son: la escala de tiempo en la que se realizan tales procesos es muy corta (del orden de nano y picosegundos) y está fuera del alcance de la mayoría de los equipos electrónicos; las escalas espaciales son también muy pequeñas (menores de $1\mu\text{m}$) para obtener gradientes de temperatura significativos por lo que los sensores de temperatura comunes no son adecuados [11]-[12]. Actualmente el desarrollo tecnológico tiende hacia escalas cada vez más pequeñas por lo que el estudio de procesos de transporte con relajamiento adquiere mayor importancia no sólo a nivel teórico.

Como se mencionó anteriormente, en la mayoría de las aplicaciones de ingeniería las relaciones constitutivas lineales entre los fluxes y las fuerzas termodinámicas describen los procesos de transporte con suficiente exactitud [13]. Para el caso de la conducción de energía los valores de los tiempos de relajamiento térmico se encuentran en el intervalo de 10^{-10} segundos para gases a condiciones estándar, a 10^{-14} segundos para los metales, mientras que para los líquidos los valores son intermedios. En consecuencia la velocidad de las ondas térmicas en metales es del orden de 10^5 m/s [14].

Por otra parte existen procesos donde las relaciones lineales de tipo Fourier no pueden describir adecuadamente los fenómenos y es necesario utilizar relaciones constitutivas generalizadas de tipo Cattaneo-Vernotte. En 1944 Peshkov [15] fue uno de los primeros investigadores en medir la velocidad de las ondas térmicas en helio líquido superfluido a 1.4 K. La velocidad de propagación de ondas térmicas se ha medido en NaF a 10 K y Bi a 3.4 K [16]-

[17]. Kaminski [18] realizó experimentos para medir tiempos de relajamiento térmico a temperatura ambiente en materiales con estructura interna no homogénea y Mitra [19] trabajó con muestras de carne procesada reportando valores del orden de segundos para el tiempo de relajamiento térmico. El uso de las radiaciones de alta energía como los rayos X y láser en aplicaciones tales como el procesamiento de materiales, sensores remotos y cirugía, es un campo donde la ley de Fourier no es apropiada para describir los procesos que generalmente son del orden de nano y picosegundos [20]-[27]. Se ha observado experimentalmente que los efectos de relajamiento térmico son significativos en los procesos de conducción de energía a micro y nanoescala, en condiciones de temperatura cercanas al cero absoluto y en donde los gradientes de temperatura y flujos de energía son muy altos.

En el caso de la difusión de masa con relajamiento las principales aplicaciones se encuentran en los procesos de lo que se conoce como difusión anómala o no fickiana en sistemas de polímeros, Neogi [28]-[29], Kim y Neogi [30], Ocone y Astarita [31], Camera-Roda y Sarti [32] han introducido en forma explícita ecuaciones constitutivas para el flux de masa con tiempos de relajamiento. Abarzhi [33] utilizó la ecuación de Cattaneo-Vernotte para describir cinéticas de adsorción en medio poroso y Aoki [34] estimó valores del orden de $31\mu\text{s}$ para los tiempos de difusión de masa con relajamiento en procesos electroquímicos. Haderler [35] utilizó el modelo de Cattaneo para describir poblaciones biológicas, Hillen [36] comparó modelos hiperbólicos para el movimiento quimiosensible de especies biológicas en una dimensión con respecto a los modelos clásicos, Dolak y Hillen [37] derivaron modelos con velocidad de propagación finita y los aplicaron para describir cualitativamente experimentos de formación de patrones de crecimiento de bacterias y amibas en medios semisólidos. Filbet et al. [38] obtuvieron modelos hiperbólicos para describir el movimiento quimiosensible de bacterias mediante una expansión de la ecuación de Chapman-Enskog y aplicaron su modelo a experimentos con células humanas en matrigel.

Las aplicaciones de la ecuación de Cattaneo a procesos de transferencia de masa y energía son múltiples y variadas, desde procesos de soldadura con rayo láser y procesos criogénicos, hasta procesos electroquímicos y biológicos. Con el desarrollo reciente de la biotecnología y el aumento en la contaminación del medio ambiente, se ha incrementado el interés en la aplicación

de técnicas para el tratamiento de zonas contaminadas con base en procesos biológicos que pueden ser descritos mediante la ecuación de Cattaneo.

Durante la primera mitad del siglo XX se desarrollaron métodos para el tratamiento de contaminantes en fase acuosa, tales como los lechos bacterianos, lodos activados o la degradación anaerobia y desde 1960 se han seguido incluyendo nuevos métodos de aplicación a los suelos y procesos para la degradación de diversos tipos de compuestos bajo la categoría de procesos de tratamiento biológico. En los últimos años se han publicado gran cantidad de estudios referidos al tratamiento de suelos contaminados por compuestos derivados del petróleo, utilizando con éxito la biorremediación [39]-[44]. Esta técnica utiliza la capacidad de los microorganismos para transformar compuestos químicos con la finalidad de disminuir o eliminar su toxicidad y se ha convertido en una alternativa prometedora para la recuperación de suelos contaminados con hidrocarburos.

2.-RESULTADOS PRELIMINARES

2.1.-DIFUSIÓN DE ENERGÍA UNIDIMENSIONAL EN UN SÓLIDO HOMOGÉNEO FINITO (PARADOJA DE TAITEL).

Para mostrar las diferencias entre los modelos de Fourier y de Cattaneo se considera la conducción de energía en un sólido homogéneo de longitud $2L$ sin términos de generación de energía. Al tiempo inicial, $t=0$, el flux de energía es nulo y la temperatura es uniforme en todo el sólido con valor T_0 , por lo anterior la variación de la temperatura con respecto al tiempo es cero para $t=0$. Súbitamente las fronteras del sólido sufren un cambio de temperatura con valor $T_w \neq T_0$ y se mantiene constante para cualquier $t>0$. El proceso mencionado fue analizado por Taitel [45] suponiendo que la conducción de energía está descrita por la ecuación de Cattaneo. Taitel obtuvo las distribuciones de temperatura en estado transitorio y observó que la temperatura en el interior del sólido puede ser mayor que T_w . Posteriormente Barletta y Zanchini [46] analizaron el mismo problema y calcularon la rapidez de generación de entropía para el proceso encontrando que puede adquirir valores negativos. Concluyeron que no se viola la segunda ley de la termodinámica debido a que la hipótesis del equilibrio local no se cumple y por lo tanto las distribuciones de temperatura en estado transitorio no se pueden interpretar en el marco de la termodinámica irreversible lineal.

Se considera un sistema coordenado en el que las fronteras del medio se encuentran en $x=L$ y $x=-L$. La ecuación que describe la distribución de la temperatura en el medio es:

$$\tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{Cattaneo}) \quad (9)$$

Si en la ecuación anterior $\tau \rightarrow 0$ se recupera la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{Fourier}) \quad (10)$$

Las condiciones iniciales para el proceso anteriormente descrito están dadas por:

$$T(x, 0) = T_0 \quad (11)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, 0) = 0 \quad (12)$$

La condición inicial definida por la ecuación (12) no se aplica a la ecuación (10), únicamente para la ecuación (9).

Condiciones de frontera:

$$T(-L, t > 0) = T_w \quad (13)$$

$$T(L, t > 0) = T_w \quad (14)$$

El flux de energía está dado por:

$$q(x, t) = -\frac{k}{\tau} \int_0^t e^{(t-t')/\tau} \frac{\partial T(x, t')}{\partial x} dt' \quad (15)$$

La rapidez de generación de entropía es:

$$\sigma(x, t) = -\frac{1}{T^2} q \frac{\partial T}{\partial x} \quad (16)$$

Definiendo las variables adimensionales:

$$\xi = \frac{x}{2L}, \eta = \frac{\alpha t}{4L^2}, \theta = \frac{T_w - T}{T_w - T_0}, \quad (17)$$

$$\chi = \frac{2Lq}{k(T_w - T_0)}, \Lambda = \frac{\alpha \tau}{4L^2}, \Sigma = \frac{4L^2 T^2 \sigma}{k(T_w - T_0)^2}, \quad (18)$$

donde ξ es la coordenada adimensional, η es el tiempo adimensional, θ es la temperatura adimensional, χ es el flux de energía adimensional, Λ es el tiempo de relajamiento adimensional y Σ es la entropía adimensional.

Sustituyendo en las ecuaciones 9 a 16:

$$\Lambda \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \quad (\text{Cattaneo}) \quad (19)$$

$$\theta(\xi, 0) = 1 \quad (20)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta}(\xi, 0) = 0 \quad (21)$$

$$\theta(-1/2, \eta > 0) = 0 \quad (22)$$

$$\theta(1/2, \eta > 0) = 0 \quad (23)$$

$$\chi(\xi, \eta) = \frac{1}{\Lambda} \int_0^\eta e^{(\eta'-\eta)/\Lambda} \frac{\partial \theta(\xi, \eta')}{\partial \xi} d\eta' \quad (24)$$

$$\Sigma(\xi, \eta) = \chi \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \quad (25)$$

La solución de la ecuación (19) se puede obtener por separación de variables y depende del valor del parámetro Λ :

$$\theta(\xi, \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \cos((2n+1)\pi\xi) F_n(\eta)$$

$$C_n = \frac{4(-1)^n}{(2n+1)\pi F(0)}$$

$$F_n(\eta) = \begin{cases} \exp\left(\frac{-\eta}{2\Lambda}\right) \left(\exp\left(\frac{\sqrt{rad_n}\eta}{2\Lambda}\right) + \left(\frac{\sqrt{rad_n}-1}{\sqrt{rad_n}+1}\right) \exp\left(\frac{-\sqrt{rad_n}\eta}{2\Lambda}\right) \right) & \text{si } rad_n > 0 \\ \exp\left(\frac{-\eta}{2\Lambda}\right) \left(\cos\left(\frac{\sqrt{-rad_n}\eta}{2\Lambda}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{-rad_n}}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{-rad_n}\eta}{2\Lambda}\right) \right) & \text{si } rad_n < 0 \\ \exp\left(\frac{-\eta}{2\Lambda}\right) \left(1 + \frac{\eta}{2\Lambda}\right) & \text{si } rad_n = 0 \\ \exp\left(- (2n+1)^2 \pi^2 \eta\right) & \text{si } rad_n = 1 \\ rad_n = 1 - 4\Lambda\pi^2 (2n+1)^2 & \end{cases}$$

(26)

En la figura 2 se muestran las distribuciones de temperatura adimensional ($1-\theta(\xi,\eta)$) utilizando la ecuación (26) con $\Lambda=1$, y $\eta=0.2$. Se observa que para $\Lambda=1$ la distribución de temperatura presenta discontinuidades que indican frentes de avance de las perturbaciones térmicas que se transmiten en el sólido con velocidad finita igual a $\Lambda^{-1/2}$. En la figura 3 se muestran las distribuciones de temperatura con $\eta=0.7$ y se nota que para $\Lambda=1$, $(T-T_0)$ puede ser mayor que (T_w-T_0) como ha sido señalado por Taitel.

En la figura 4 se observa cómo la temperatura tiende a su valor de equilibrio para $\xi=0.25$. En el caso de la conducción de Fourier, $\Lambda=0$, la temperatura se incrementa en forma monótona desde 0 hasta 1. Para el caso de la conducción con $\Lambda=1$, la temperatura de equilibrio se establece después de un proceso oscilatorio alrededor de 1.

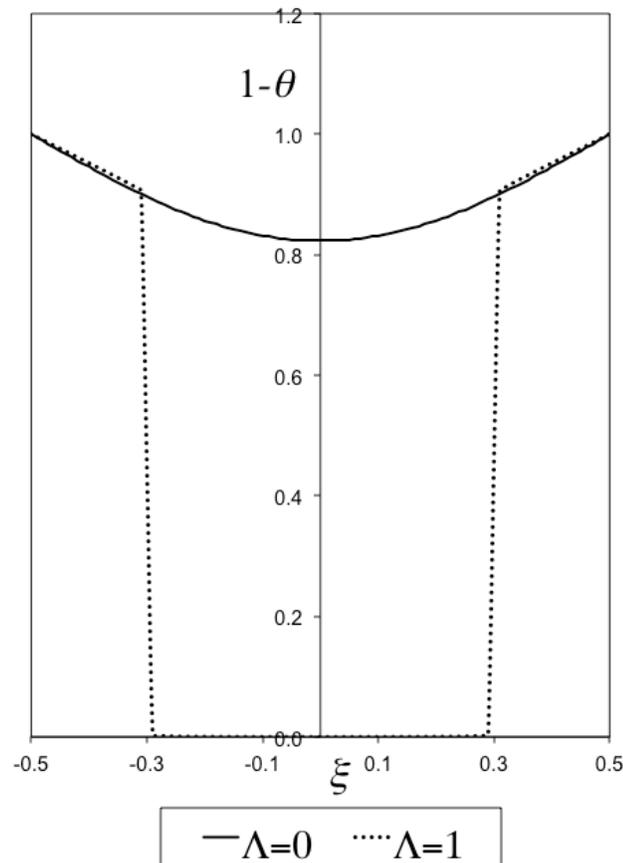


Figura 2. Distribuciones de temperatura adimensional, $(1-\theta)$ para $\eta=0.2$, $\Lambda=0$ (Fourier) y $\Lambda=1$ (Cattaneo).

Para determinar la rapidez de generación de entropía adimensional, ecuación (25), se requiere determinar el flux adimensional de energía y el gradiente de temperatura. El gradiente de temperatura no se puede obtener en forma directa por diferenciación término a término de la ecuación (26) para $\Lambda > 0$ debido a que la serie no es uniformemente convergente, por otra parte el flux de energía sí se puede obtener a partir de las ecuaciones (24) y (26) de la siguiente forma:

$$\chi(\xi, \eta) = \frac{1}{\Lambda} \int_0^\eta \frac{\partial}{\partial \xi} [e^{(\eta' - \eta) / \Lambda} \theta(\xi, \eta')] d\eta' \quad (27)$$

$$\chi(\xi, \eta) = \frac{1}{\Lambda} \frac{\partial}{\partial \xi} \int_0^\eta [e^{(\eta' - \eta) / \Lambda} \theta(\xi, \eta')] d\eta' \quad (28)$$

para $rad_n < 0$ (29)

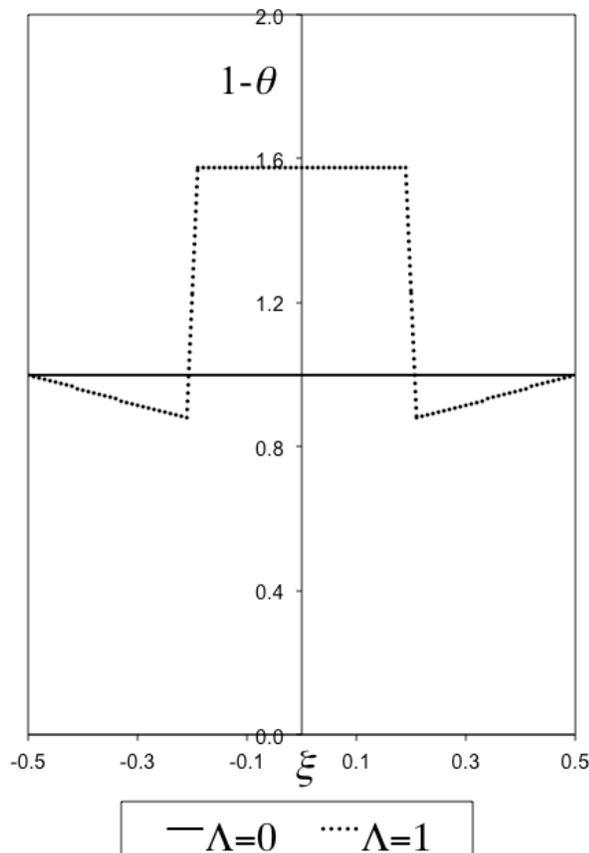


Figura 3. Distribuciones de temperatura adimensional, $(1-\theta)$ para $\eta=0.7$, $\Lambda=0$ (Fourier) y $\Lambda=1$ (Cattaneo).

En la figura 5 se representa el flux de energía adimensional para $\Lambda=1$ y $\eta=0.7$. Debido a la simetría del problema el flux de energía es cero en el centro del sólido y presenta saltos como consecuencia de la discontinuidad del gradiente de temperatura. Utilizando la ecuación (25), (29) y los datos de la figura 3 para aproximar numéricamente el gradiente de temperatura, se calculó la rapidez de generación de entropía para $\Lambda=1$ y $\eta=0.7$. Los resultados se muestran en la figura 6 y se comparan con la distribución reportada por Barletta y Zanchini para el mismo problema.

Barletta y Zanchini concluyen que el incremento excesivo de temperatura en el interior del sólido no representa una violación de la segunda ley de la termodinámica debido a que está acompañado por valores negativos de la rapidez de generación de entropía y por lo tanto la hipótesis del equilibrio local no es aplicable.

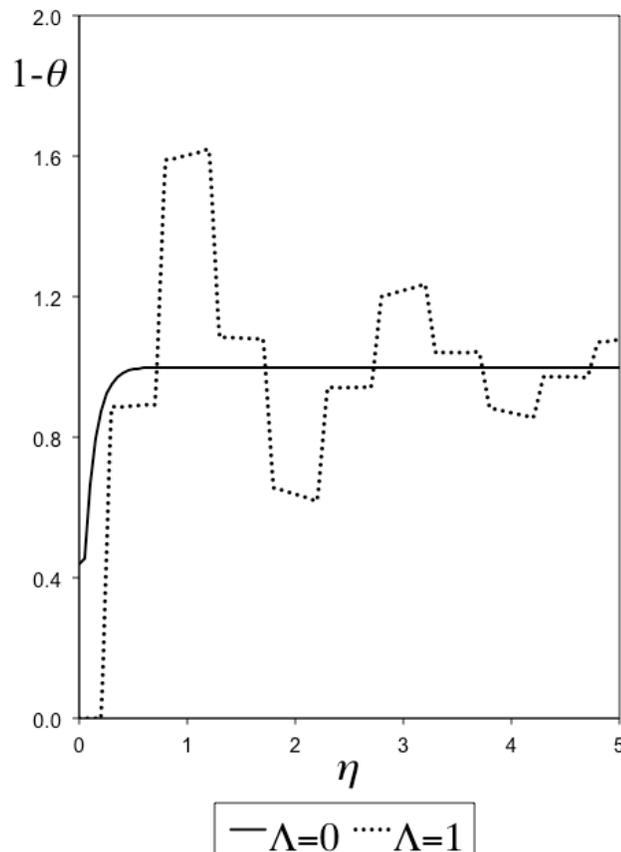


Figura 4. Temperatura adimensional, $(1-\theta)$ para $\xi=0.25$, $\Lambda=0$ (Fourier) y $\Lambda=1$ (Cattaneo).

2.2.-DIFUSIÓN DE ENERGÍA BIDIMENSIONAL EN UN SÓLIDO ORTOTRÓPICO FINITO.

Los materiales con propiedades anisotrópicas se han utilizado en forma extensa en múltiples aplicaciones desde la década de 1960. Con el desarrollo de nuevos materiales sintéticos se ha incrementado el interés en los problemas de conducción de energía en medios anisotrópicos, es decir, en materiales cuya conductividad térmica depende de la dirección. La ley de Fourier para medios anisotrópicos se puede escribir como:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k} \cdot \nabla T \tag{30}$$

La conductividad térmica está representada por un tensor de segundo orden \mathbf{k} . El tensor de conductividad térmica no puede tomar valores en forma arbitraria, debe ser positivo semidefinido para satisfacer las hipótesis de la termodinámica irreversible lineal, por lo tanto los invariantes de \mathbf{k} deben ser también positivos semidefinidos [47].

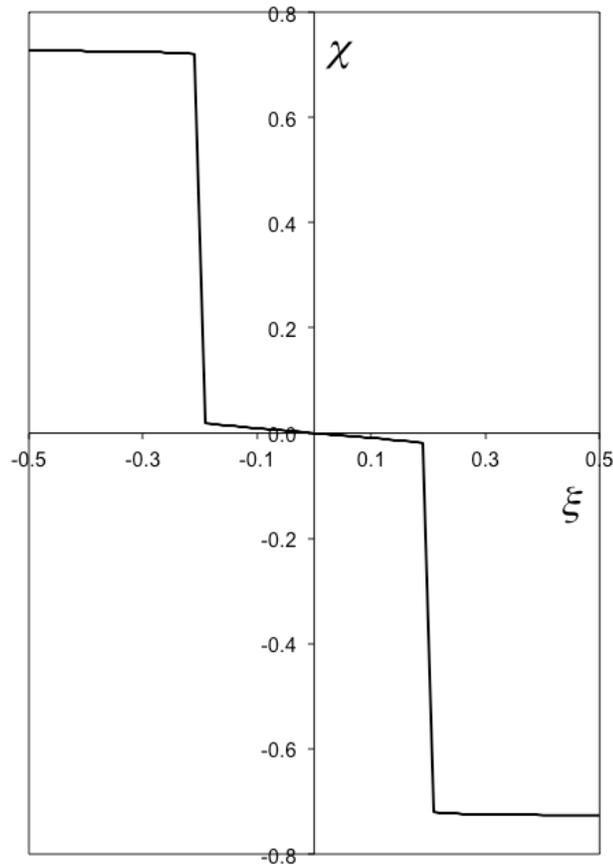


Figura 5. Distribuciones de flujo de energía adimensional, χ , para $\eta=0.7$ y $\Lambda=1$.

La generalización de la ecuación (30) al caso de la conducción de energía con velocidad de propagación finita se puede obtener postulando que un gradiente de temperatura al tiempo t genera un flux de energía al tiempo $t + \tau$:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t + \tau) = -\mathbf{k} \cdot \nabla T(\mathbf{r}, t) \quad , \quad (31)$$

desarrollando en series de Taylor alrededor de τ :

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) + \tau \frac{\partial \mathbf{q}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + O(\tau^2) = -\mathbf{k} \cdot \nabla T(\mathbf{r}, t) \quad , \quad (32)$$

suponiendo que τ es suficientemente pequeño para despreciar los términos de orden dos y superiores, la ecuación (32) se puede simplificar para obtener la ecuación de Cattaneo para medio anisotrópico:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) + \tau \frac{\partial \mathbf{q}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\mathbf{k} \cdot \nabla T(\mathbf{r}, t) \quad (33)$$

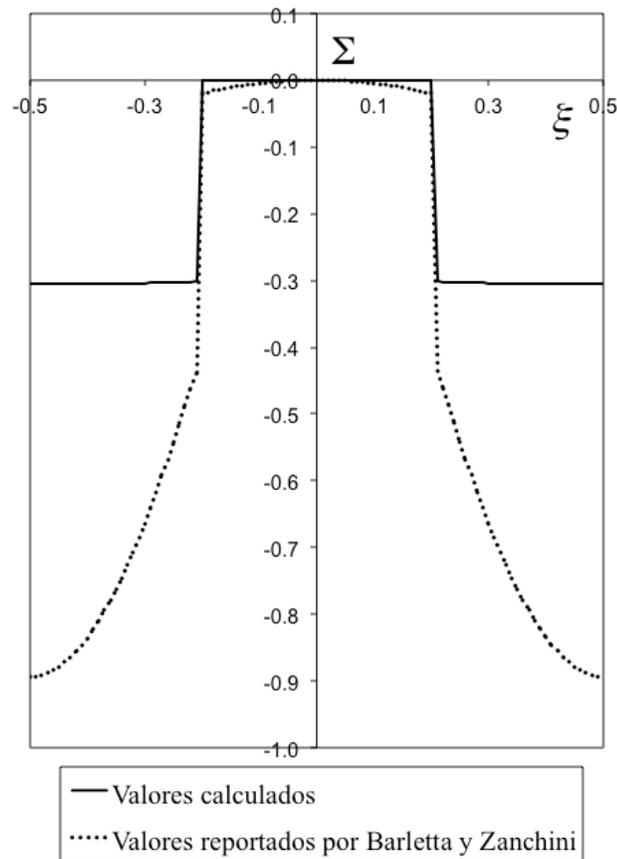


Figura 6. Distribuciones de rapidez de generación de entropía adimensional para $\Lambda=1$ y $\eta=0.7$.

Para comparar entre sí las ecuaciones (30) y (33) se considera la conducción de energía en un sólido bidimensional cuadrado de longitud L cuya conductividad térmica es diferente en tres direcciones mutuamente perpendiculares y está representada por el tensor ortotrópico:

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{pmatrix}, \quad k_x \neq k_y \neq k_z \quad (34)$$

Al combinar las ecuaciones (2), (33) y (34) se obtiene la ecuación de variación para la temperatura:

$$\rho C_v \tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \rho C_v \frac{\partial T}{\partial t} = k_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (35)$$

Para extender el problema de Taitel a un medio ortotrópico se definen las siguientes condiciones iniciales y de frontera:

$$T(x, y, 0) = T_0 \quad (36)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, y, 0) = 0 \quad (37)$$

$$T(0, y, t > 0) = T(L, y, t > 0) = T(x, 0, t > 0) = T(x, L, t > 0) = T_w \quad (38)$$

Se definen las siguientes variables y parámetros adimensionales:

$$\xi = \frac{x}{L}, \psi = \frac{y}{L}, \eta = \frac{k_x t}{\rho C_v L^2}, \quad (39)$$

$$\theta = \frac{T_w - T}{T_w - T_0}, \Lambda = \frac{k_x \tau}{\rho C_v L^2}, R_{yy} = \frac{k_y}{k_x}, \quad (40)$$

donde ξ es la coordenada adimensional en x , ψ es la coordenada adimensional en y , η es el tiempo adimensional con respecto al coeficiente de difusión de energía en dirección x , θ es la temperatura adimensional, Λ es el tiempo de relajamiento adimensional y R_{yy} es la relación de conductividades térmicas que se puede interpretar como una medida de la anisotropía del medio.

Sustituyendo (39) y (40) en las ecuaciones (35)-(38):

$$\Lambda \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + R_{yy} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \psi^2} \quad (41)$$

$$\theta(\xi, \psi, 0) = 1 \quad (42)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta}(\xi, \psi, 0) = 0 \quad (43)$$

$$\theta(0, \psi, \eta > 0) = \theta(1, \psi, \eta > 0) = \theta(\xi, 0, \eta > 0) = \theta(\xi, 1, \eta > 0) = 0 \quad (44)$$

La solución de las ecuaciones anteriores se puede obtener por separación de variables:

$$\theta(\xi, \psi, \eta) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{nm} F_{nm}(\eta) \sin(n\pi\xi) \sin(m\pi\psi)$$

$$C_{nm} = \frac{4}{F_{nm}(0)} \left(\frac{1 - (-1)^n}{n\pi} \right) \left(\frac{1 - (-1)^m}{m\pi} \right)$$

$$F_{nm}(\eta) = \begin{cases} \exp\left(\frac{-\eta}{2\Lambda}\right) \left(\exp\left(\frac{\sqrt{rad_{nm}} \eta}{2\Lambda}\right) + \left(\frac{\sqrt{rad_{nm}} - 1}{\sqrt{rad_{nm}} + 1}\right) \exp\left(\frac{-\sqrt{rad_{nm}} \eta}{2\Lambda}\right) \right) & \text{si } rad_{nm} > 0 \\ \exp\left(\frac{-\eta}{2\Lambda}\right) \left(\cos\left(\frac{\sqrt{-rad_{nm}} \eta}{2\Lambda}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{-rad_{nm}}}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{-rad_{nm}} \eta}{2\Lambda}\right) \right) & \text{si } rad_{nm} < 0 \\ \exp\left(\frac{-\eta}{2\Lambda}\right) \left(1 + \frac{\eta}{2\Lambda} \right) & \text{si } rad_{nm} = 0 \\ \exp\left(-\left(n^2 + R_{yy} m^2\right) \pi^2 \eta\right) & \text{si } rad_{nm} = 1 \\ rad_{nm} = 1 - 4\Lambda\pi^2 \left(n^2 + R_{yy} m^2\right) & \end{cases} \quad (45)$$

En la figura 7a) se muestra la distribución de temperatura adimensional $(1-\theta)$ para $\Lambda=0$ (Fourier), $\eta=0.05$ y $R_{yy}=0.1$. Se puede observar que la menor conductividad térmica en el eje ψ produce un flujo de energía menor con respecto al eje ξ y por lo tanto se obtiene una distribución de temperatura asimétrica con respecto al centro geométrico de la placa. En la figura 7b) se presenta la distribución de temperatura adimensional para el caso de un material isotrópico ($\Lambda=0$, $\eta=0.05$ y $R_{yy}=1$), se nota la ausencia de un flujo preferencial de energía y como consecuencia se aprecia una distribución de temperatura simétrica, se observa también que el proceso tiende al equilibrio más rápidamente que el caso anterior. La figura 7c) presenta los resultados para $\Lambda=0$, $\eta=0.01$ y $R_{yy}=10$, se evalúa un tiempo adimensional menor ya que al incrementar el valor del parámetro R_{yy} la velocidad con que se alcanza el equilibrio es mayor. En este caso los incrementos de temperatura máximos se encuentran a lo largo del eje ψ pero la asimetría de la distribución de temperatura es menos notable porque el proceso es más rápido. En la figura 8a) se muestra la distribución de temperatura adimensional $(1-\theta)$ para $\Lambda=0.024$, $\eta=0.05$ y $R_{yy}=0.1$, se observan cuatro frentes de ondas térmicas bien definidos que provienen de las fronteras perturbadas del sistema; aún para tiempos cortos se presentan regiones en el interior de la placa donde la temperatura es mayor que las perturbaciones iniciales, esto se debe al choque de ondas que se realiza cerca de las esquinas del sistema; se observa también que las ondas térmicas paralelas al eje ξ viajan con una velocidad mayor que las ondas térmicas que se desplazan paralelas al eje ψ , lo anterior es consistente con el valor del parámetro R_{yy} ya que la velocidad de la onda depende directamente de la conductividad térmica, $C_x=(\alpha_x/\tau)^{1/2}$ y $C_y=(\alpha_y/\tau)^{1/2}$, son las velocidades de las ondas térmicas que se propagan paralelas a los ejes x e y , respectivamente; por lo tanto, se tiene la siguiente relación entre el parámetro R_{yy} y las velocidades de las ondas térmicas que se producen en un material ortotrópico, $R_{yy}=(C_y/C_x)^2$.

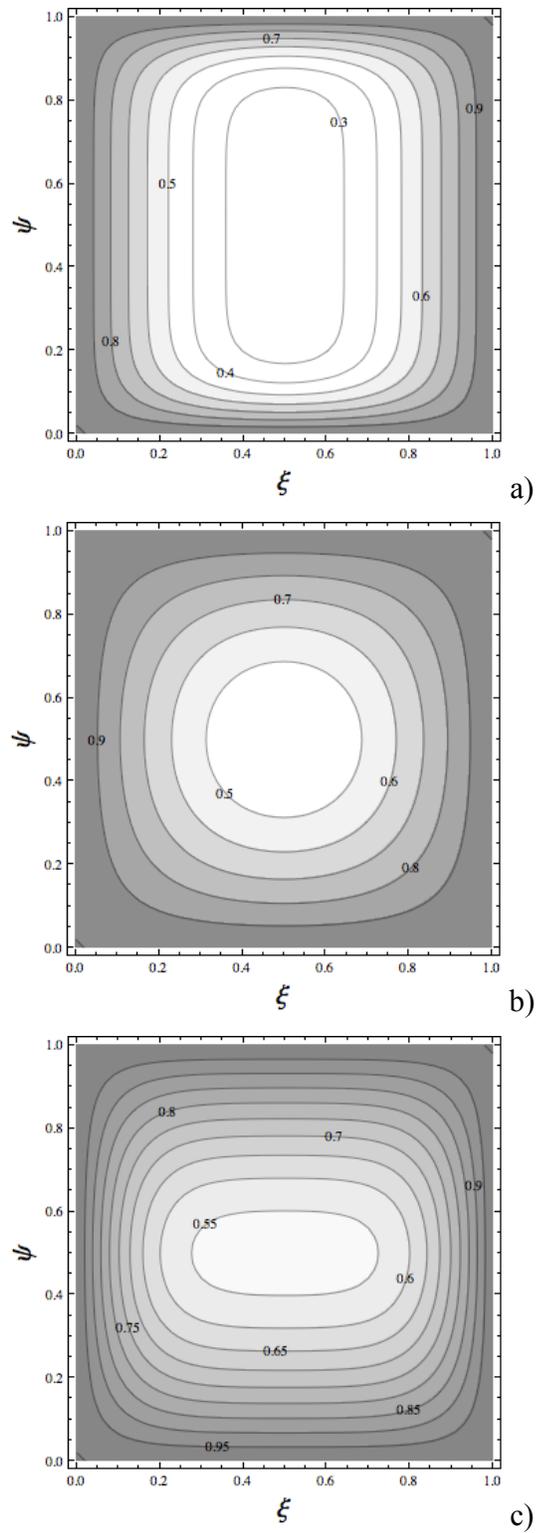


Figura 7. Distribución de temperatura adimensional ($1-\theta$) para $\Lambda=0$ (Fourier) y diferentes condiciones. a) $\eta=0.05$ y $R_{yy}=0.1$. b) $\eta=0.05$ y $R_{yy}=1$. c) $\eta=0.01$ $R_{yy}=10$.

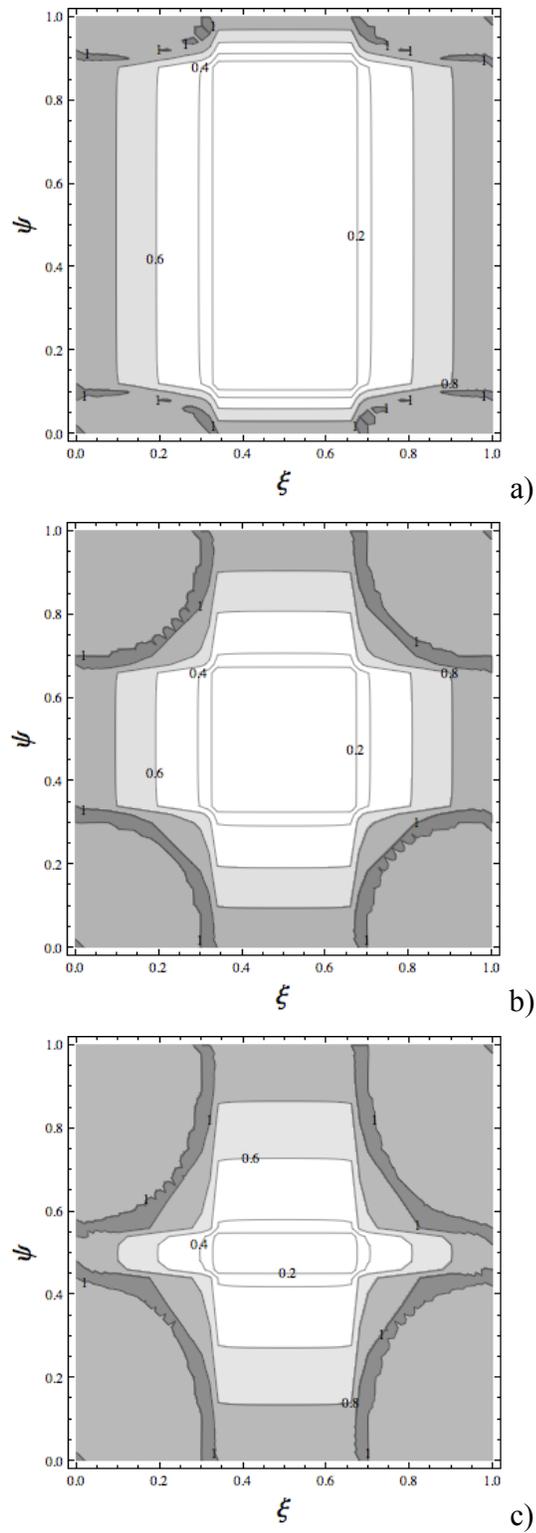


Figura 8. Distribución de temperatura adimensional $(1-\theta)$ para $\Lambda=0.024$, $\eta=0.05$ y diferentes valores del parámetro R_{yy} . a) $R_{yy}=0.1$. b) $R_{yy}=1$. c) $R_{yy}=2$.

3.-ONDAS TÉRMICAS EN UN MEDIO ORTOTRÓPICO GENERADAS POR CALENTAMIENTO CON LÁSER.

3.1.-INTRODUCCIÓN

Actualmente se está incrementando el uso de radiaciones láser en diferentes aplicaciones en la industria y la medicina debido principalmente a las ventajas que ofrece en precisión y exactitud como medio de calentamiento. Los equipos de láser comerciales se pueden operar en forma continua o pulsada según lo requiera una aplicación específica, como se puede presentar en el procesamiento de materiales o en procedimientos quirúrgicos [48]. La característica principal del calentamiento con láser es que permite un control preciso de la cantidad de energía suministrada a un medio, lo cual puede evitar sobrecalentamientos no deseados en zonas próximas a la que se requiere tratar.

En muchas aplicaciones con láser se utilizan pulsos de muy corta duración, del orden de pico y nanosegundos, y altas concentraciones de energía (10^9 W/cm) [49]; bajo tales condiciones, no se puede despreciar el hecho de que la velocidad de propagación de la energía, aunque es muy alta, es finita y por lo tanto la ecuación clásica de difusión de Fourier no es aplicable [50]. En este caso se puede emplear como alternativa la ecuación de Maxwell-Cattaneo (ecuación (7)) considerando que existe un tiempo finito característico de retraso (τ) entre el gradiente de temperatura y el flux de energía.

En la literatura se pueden encontrar una gran cantidad de trabajos de investigación reportados sobre difusión de energía generada por una fuente láser que consideran sistemas unidimensionales; sin embargo, son relativamente pocos los estudios que tratan materiales con propiedades anisotrópicas tales como polímeros [51]-[54]. Por lo anterior es importante desarrollar y evaluar modelos matemáticos que describan adecuadamente las propiedades físicas de materiales complejos.

En esta sección se estudia la difusión de energía hiperbólica producida por el calentamiento con radiación láser de un material ortotrópico. El enfoque se realiza sobre las

propiedades del medio como el tiempo de relajamiento térmico, la conductividad térmica anisotrópica y el coeficiente de absorción, así como en la interacción de las ondas térmicas producidas por la transferencia de energía.

3.2.-MODELO MATEMÁTICO Y ESQUEMA NUMÉRICO

El sistema analizado consiste de una placa cuadrada de lado L que se encuentra a una temperatura inicial uniforme T_0 (ver Figura 9). En forma repentina un rayo láser es aplicado sobre dos lados adyacentes del sistema, mientras que los otros dos lados se mantienen aislados (el flujo de energía es nulo). En el modelo se supone que los mecanismos de convección (interacción del aire circundante con la placa) y radiación son insignificantes por lo que no se incluyen estos términos.

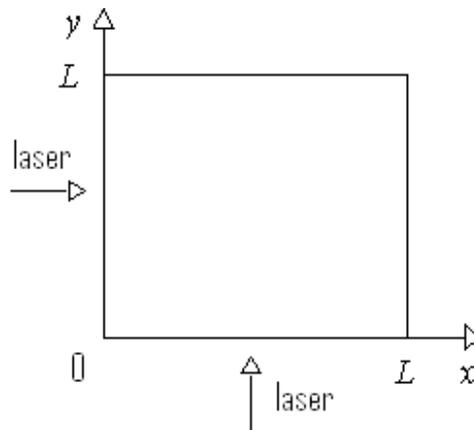


Figura 9. Sistema coordenado.

La ecuación de balance de energía está representada por:

$$\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = S(x, y) \quad (46)$$

El flux de energía en la dirección z no se incluye porque el proceso se lleva a cabo en el plano x - y . El término $S(x,y)$ representa a la fuente de energía generada por la radiación láser y se supone que es independiente del tiempo, es decir, el láser es operado en forma continua.

De acuerdo con Zubair y Chaudhry [55], $S(x,y)$ se puede escribir como:

$$S(x, y) = I(1 - r)\mu \exp(-\mu x) + I(1 - r)\mu \exp(-\mu y) \quad (47)$$

El parámetro I es la intensidad del láser (se supone constante), r es la reflectancia superficial del material y μ es el coeficiente de absorción. Las ecuaciones para el flux de energía en dirección x e y de acuerdo con la ecuación (33) son:

$$q_x + \tau \frac{\partial q_x}{\partial t} = -k_x \frac{\partial T}{\partial x} \quad (48)$$

$$q_y + \tau \frac{\partial q_y}{\partial t} = -k_y \frac{\partial T}{\partial y} \quad (49)$$

Las condiciones iniciales y de frontera para el problema antes descrito son:

Condiciones iniciales:

$$T(x, y, 0) = T_0 \quad (50)$$

$$q_x(x, y, 0) = 0 \quad (51)$$

$$q_y(x, y, 0) = 0 \quad (52)$$

Condiciones de frontera:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(0, y, t > 0) = 0 \quad (53)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(1, y, t > 0) = 0 \quad (54)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y}(x, 0, t > 0) = 0 \quad (55)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y}(x, 1, t > 0) = 0 \quad (56)$$

$$q_x(0, y, t > 0) = 0 \quad (57)$$

$$q_x(1, y, t > 0) = 0 \quad (58)$$

$$\frac{\partial q_x}{\partial y}(x, 0, t > 0) = 0 \quad (59)$$

$$\frac{\partial q_x}{\partial y}(x, 1, t > 0) = 0 \quad (60)$$

$$\frac{\partial q_y}{\partial x}(0, y, t > 0) = 0 \quad (61)$$

$$\frac{\partial q_y}{\partial x}(1, y, t > 0) = 0 \quad (62)$$

$$q_y(x, 0, t > 0) = 0 \quad (63)$$

$$q_y(x, 1, t > 0) = 0 \quad (64)$$

Las siguientes variables adimensionales se definen para simplificar la solución de las ecuaciones anteriores:

$$\xi = x / L \quad \text{coordenada adimensional en dirección } x \quad (65)$$

$$\psi = y / L \quad \text{coordenada adimensional en dirección } y \quad (66)$$

$$\eta = k_x t / (\rho C_v L^2) \quad \text{tiempo adimensional} \quad (67)$$

$$\theta = (T - T_0) / T_0 \quad \text{temperatura adimensional} \quad (68)$$

$$\chi_\xi = (L q_x) / (k_x T_0) \quad \text{flux de energía adimensional en dirección } x \quad (69)$$

$$\chi_\psi = (L q_y) / (k_x T_0) \quad \text{flux de energía adimensional en dirección } y \quad (70)$$

$$\Lambda = k_x \tau / (\rho C_v L^2) \quad \text{tiempo de relajamiento adimensional} \quad (71)$$

$$R = k_y / k_x \quad \text{relación de conductividades térmicas} \quad (72)$$

$$a = (I(1-r)\mu L^2) / (k_x T_0) \quad \text{intensidad del láser adimensional} \quad (73)$$

$$b = \mu L \quad \text{coeficiente de absorción adimensional} \quad (74)$$

Sustituyendo las ecuaciones (65)-(74) en (46)-(64), se obtiene:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta} + \frac{\partial \chi_{\xi}}{\partial \xi} + \frac{\partial \chi_{\psi}}{\partial \psi} = a \left(\exp(-b\xi) + \exp(-b\psi) \right) \quad (75)$$

$$\chi_{\xi} + \Lambda \frac{\partial \chi_{\xi}}{\partial \eta} + \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0 \quad (76)$$

$$\chi_{\psi} + \Lambda \frac{\partial \chi_{\psi}}{\partial \eta} + R \frac{\partial \theta}{\partial \psi} = 0 \quad (77)$$

con las siguientes condiciones iniciales y de frontera:

$$\theta(\xi, \psi, 0) = 0 \quad (78)$$

$$\chi_{\xi}(\xi, \psi, 0) = 0 \quad (79)$$

$$\chi_{\psi}(\xi, \psi, 0) = 0 \quad (80)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \xi}(0, \psi, \eta > 0) = 0 \quad (81)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \xi}(1, \psi, \eta > 0) = 0 \quad (82)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \psi}(\xi, 0, \eta > 0) = 0 \quad (83)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \psi}(\xi, 1, \eta > 0) = 0 \quad (84)$$

$$\chi_{\xi}(0, \psi, \eta > 0) = 0 \quad (85)$$

$$\chi_{\xi}(1, \psi, \eta > 0) = 0 \quad (86)$$

$$\frac{\partial \chi_{\xi}}{\partial \psi}(\xi, 0, \eta > 0) = 0 \quad (87)$$

$$\frac{\partial \chi_{\xi}}{\partial \psi}(\xi, 1, \eta > 0) = 0 \quad (88)$$

$$\frac{\partial \chi_{\psi}}{\partial \xi}(0, \psi, \eta > 0) = 0 \quad (89)$$

$$\frac{\partial \chi_{\psi}}{\partial \xi}(1, \psi, \eta > 0) = 0 \quad (90)$$

$$\chi_{\psi}(\xi, 0, \eta > 0) = 0 \quad (91)$$

$$\chi_{\psi}(\xi, 1, \eta > 0) = 0 \quad (92)$$

Para resolver las ecuaciones (75)-(92) se utilizó el método de McCormack el cual ha sido aplicado y verificado en problemas de difusión de energía con relajamiento por varios investigadores [56]-[58]. El cálculo numérico de las variables de temperatura y flux de energía es más eficiente si ambas se mantienen en el esquema de solución, debido al fuerte acoplamiento entre éstas [59]. El esquema resultante es:

Predictor:

$$\theta_{i,j}^{*n+1} = \theta_{i,j}^n - \Delta\eta \left(\chi_{\xi i+1,j}^n - \chi_{\xi i,j}^n \right) / \Delta\xi - \Delta\eta \left(\chi_{\psi i,j+1}^n - \chi_{\psi i,j}^n \right) / \Delta\psi + a\Delta\eta \left(\exp(-b\Delta\xi(i-1)) + \exp(-b\Delta\psi(j-1)) \right) \quad (93)$$

$$\chi_{\xi i,j}^{*n+1} = \chi_{\xi i,j}^n - \Delta\eta \left(\theta_{i+1,j}^n - \theta_{i,j}^n \right) / (\Lambda\Delta\xi) - \Delta\eta \chi_{\xi i,j}^n / \Lambda \quad (94)$$

$$\chi_{\psi i,j}^{*n+1} = \chi_{\psi i,j}^n - \Delta\eta R \left(\theta_{i,j+1}^n - \theta_{i,j}^n \right) / (\Lambda\Delta\psi) - \Delta\eta \chi_{\psi i,j}^n / \Lambda \quad (95)$$

Corrector:

$$\theta_{i,j}^{n+1} = \left\{ \theta_{i,j}^n + \theta_{i,j}^{*n+1} - \Delta\eta \left(\chi_{\xi i,j}^{*n+1} - \chi_{\xi i-1,j}^{*n+1} \right) / \Delta\xi - \Delta\eta \left(\chi_{\psi i,j}^{*n+1} - \chi_{\psi i,j-1}^{*n+1} \right) / \Delta\psi + a\Delta\eta \left(\exp(-b\Delta\xi(i-1)) + \exp(-b\Delta\psi(j-1)) \right) \right\} / 2 \quad (96)$$

$$\chi_{\xi i,j}^{n+1} = \left\{ \chi_{\xi i,j}^n + \chi_{\xi i,j}^{*n+1} - \Delta\eta \left(\theta_{i,j}^{*n+1} - \theta_{i-1,j}^{*n+1} \right) / (\Lambda\Delta\xi) - \Delta\eta \chi_{\xi i,j}^{*n+1} / \Lambda \right\} / 2 \quad (97)$$

$$\chi_{\psi i,j}^{n+1} = \left\{ \chi_{\psi i,j}^n + \chi_{\psi i,j}^{*n+1} - \Delta\eta R \left(\theta_{i,j}^{*n+1} - \theta_{i,j-1}^{*n+1} \right) / (\Lambda\Delta\psi) - \Delta\eta \chi_{\psi i,j}^{*n+1} / \Lambda \right\} / 2 \quad (98)$$

De acuerdo con las ecuaciones anteriores, el esquema es explícito en el tiempo ya que las variables al tiempo $n+1$ (predictor) dependen de las variables al tiempo n , y finalmente para avanzar al tiempo $n+1$ se requiere de las variables al tiempo n y $n+1$. Los parámetros $\Delta\xi$, $\Delta\psi$ y $\Delta\eta$, son las dimensiones de cada celda en dirección ξ , ψ , y el incremento en el tiempo, respectivamente; i y j representan un punto de la malla y n es el avance en el tiempo. Los valores $\Delta\xi=\Delta\psi=10^{-3}$ y $\Delta\eta=2.0\times 10^{-4}$ fueron utilizados para obtener las soluciones numéricas y el valor del parámetro adimensional de la intensidad del láser, a , se fijó igual a 1 para simplificar el análisis; por lo tanto, se evaluó el efecto de los parámetros restantes (Λ , R y b) en las distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ). El esquema numérico se verificó para un problema unidimensional. Un medio finito de longitud L se encuentra inicialmente a una temperatura uniforme T_0 . En un extremo ($x=0$) se aplica un láser mientras que en el extremo opuesto ($x=L$) se mantiene la temperatura inicial, por ejemplo mediante un baño de temperatura. Las distribuciones transitorias de temperatura resultantes del esquema numérico de solución se comparan con las obtenidas a partir de la solución analítica que se puede derivar por medio del método de separación de variables (ver apéndice).

Las figuras 10 y 11 muestran los perfiles transitorios de temperatura adimensional (θ) para diferentes tiempos adimensionales (η). Las líneas continuas representan las soluciones analíticas mientras que las soluciones numéricas se muestran mediante los símbolos. En las soluciones obtenidas no se presentan los frentes de onda definidos que son característicos de procesos puramente difusivos, lo anterior es consecuencia del término fuente del láser. Se comparan dos valores del parámetro $b=1$ y 10 , en este intervalo los mecanismos de generación y difusión de energía son significativos, para valores mayores de b , el término fuente se aproxima a un flujo de energía superficial (condición de frontera), y para valores menores satura el medio y controla el proceso. Los resultados numéricos se ajustan bien con la solución analítica, por lo tanto el esquema se aplicó al sistema bidimensional para estudiar los efectos de la anisotropía térmica y el tiempo de relajamiento en las distribuciones de temperatura.

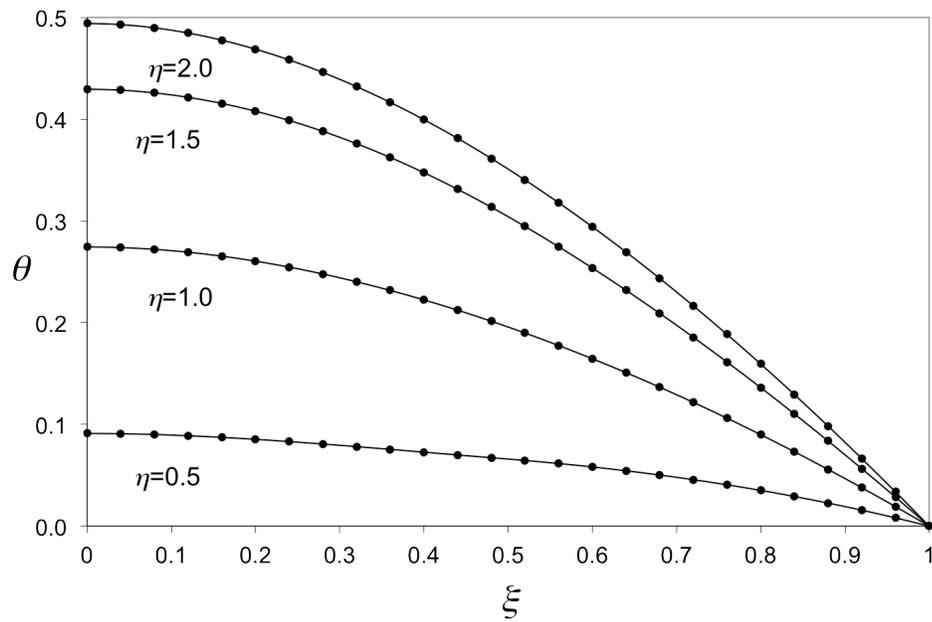


Figura 10. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=1$, $\eta=0.5$, 1.0 , 1.5 , 2.0 . Línea continua: solución analítica, \bullet : solución numérica.

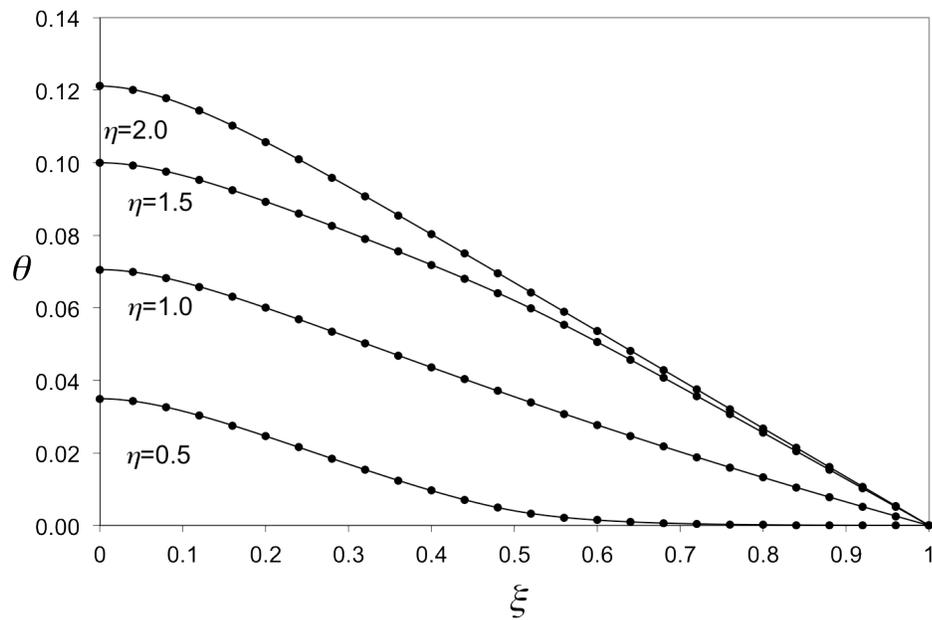


Figura 11. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=10$, $\eta=0.5$, 1.0 , 1.5 , 2.0 . Línea continua: solución analítica, \bullet : solución numérica.

3.3.-EFECTO DEL TIEMPO DE RELAJAMIENTO (Λ)

En las figuras 12 y 13 se muestran las distribuciones transitorias de temperatura adimensional para diferentes tiempos adimensionales ($\eta=0.2, 0.4$ y 0.6) y tiempos de relajamiento ($\Lambda=0.1$ y 1.0). En la figura 12 se observan dos frentes de onda térmicas que emergen desde las fronteras irradiadas para $\Lambda=1.0$. La interacción de estos frentes genera una acumulación de energía que produce a su vez incrementos máximos de temperatura en la regiones donde convergen. Las ondas continúan su avance hasta que casi toda la placa ha incrementado su temperatura mientras que en el origen del sistema coordenado se presenta la temperatura más alta.

En la figura 13 se muestran los resultados para $\Lambda=0.1$ donde se nota que la velocidad de las ondas térmicas se incrementa ya que el tiempo adimensional de relajamiento disminuye; por otra parte, los frentes de onda se generan, chocan y desaparecen más rápido y los incrementos de temperatura son menores para $\xi \rightarrow 0$ y $\psi \rightarrow 0$, y mayores para $\xi \rightarrow 1$ y $\psi \rightarrow 1$, en comparación con las distribuciones de la figura 12. Lo anterior significa una mejor distribución de la energía al interior del medio así como una tendencia hacia un proceso de Fourier ($\Lambda=0$) donde la velocidad de las ondas es infinita.

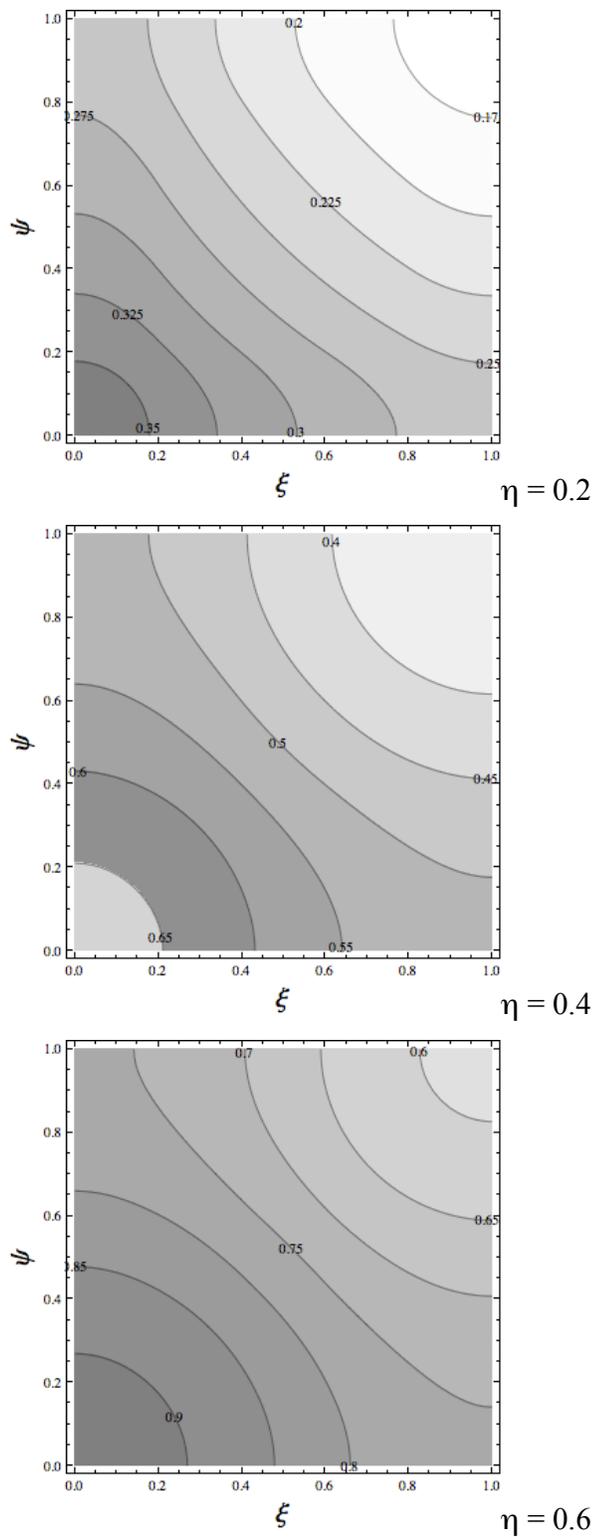


Figura 12. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=1$, $R=1$, $\eta=0.2$, 0.4 y 0.6 .

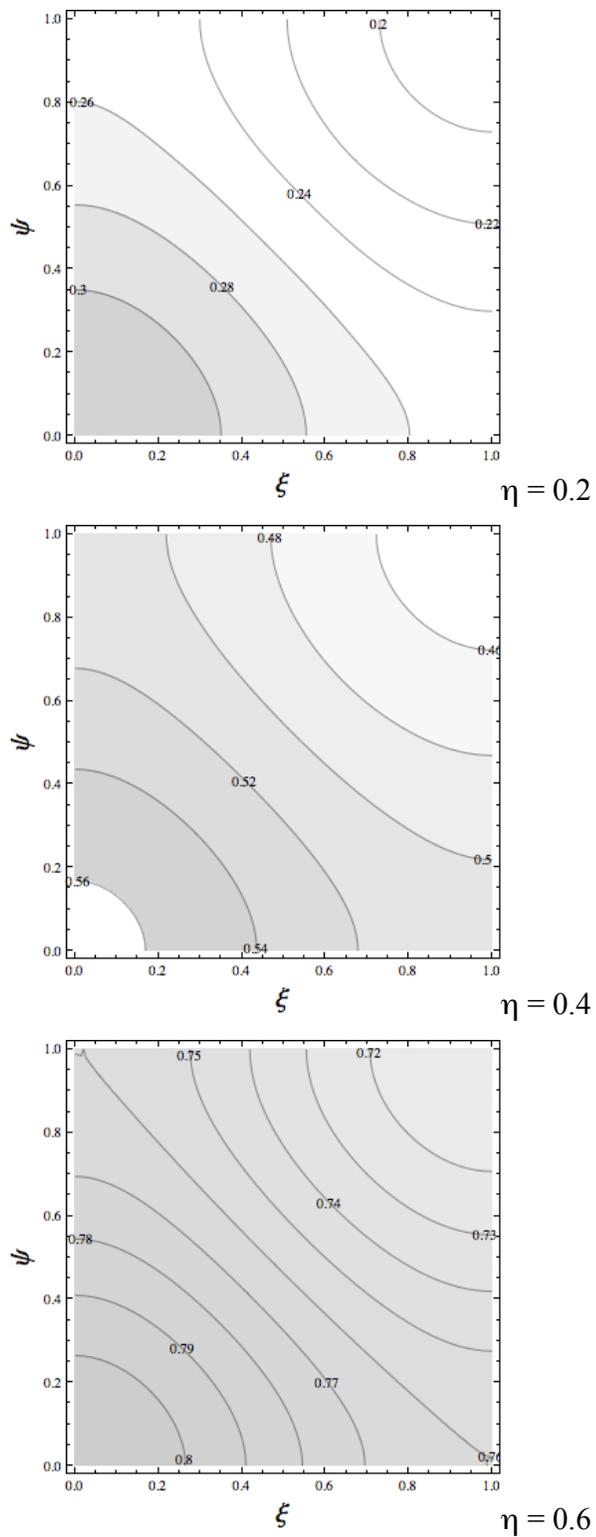


Figura 13. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=0.1$, $a=1$, $b=1$, $R=1$, $\eta=0.2$, 0.4 y 0.6 .

3.4.-EFECTO DE LA ANISOTROPÍA DEL MATERIAL (R , RELACIÓN DE CONDUCTIVIDADES TÉRMICAS)

La figura 14 muestra las distribuciones de temperatura para un material ortotrópico con $R=0.1$, $\Lambda=0.1$ y diferentes tiempos adimensionales; como consecuencia, la velocidad de las ondas térmicas en dirección ψ es menor que en dirección ξ . La anisotropía del medio produce un flujo preferencial de energía que a su vez genera una región de alta temperatura para $\psi \rightarrow 0$, y otra de baja temperatura para $\xi \rightarrow 0$, este efecto se hace más evidente al avanzar el tiempo de proceso. La figura 15 muestra el caso opuesto, un material con una mayor conductividad térmica en dirección ψ ($R=5$). Las ondas térmicas son más rápidas en dirección ψ por lo que la región de alta temperatura se encuentra para $\xi \rightarrow 0$ y la de baja temperatura para $\psi \rightarrow 0$; se observa también una mejor distribución de energía definida por la menor magnitud del gradiente de temperatura en comparación con la figura 14.

Es importante mencionar que debido a que el tiempo adimensional de relajamiento(Λ) depende de la longitud característica del sistema (L), siempre existe una escala espacial donde el efecto del relajamiento térmico es significativo aún para materiales con tiempos característicos muy cortos como los metales y la mayoría de las sustancias homogéneas.

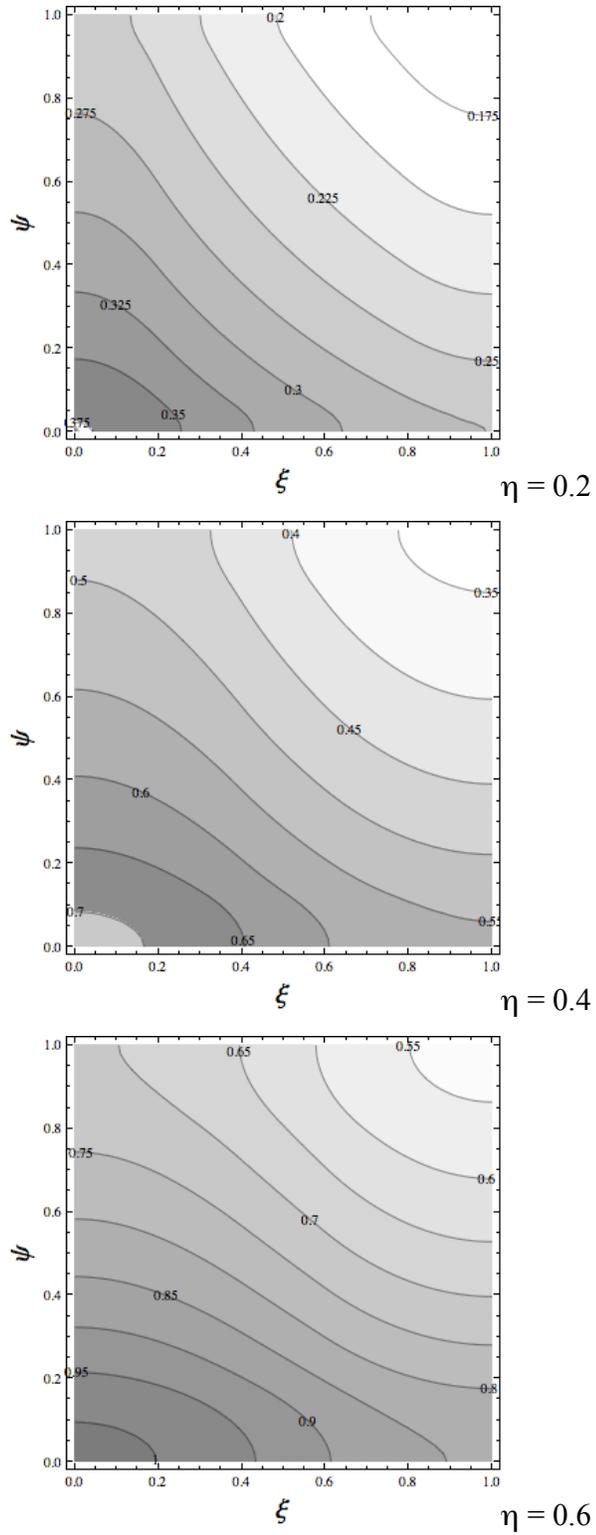


Figura 14. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=1$, $R=0.1$, $\eta=0.2$, 0.4 y 0.6.

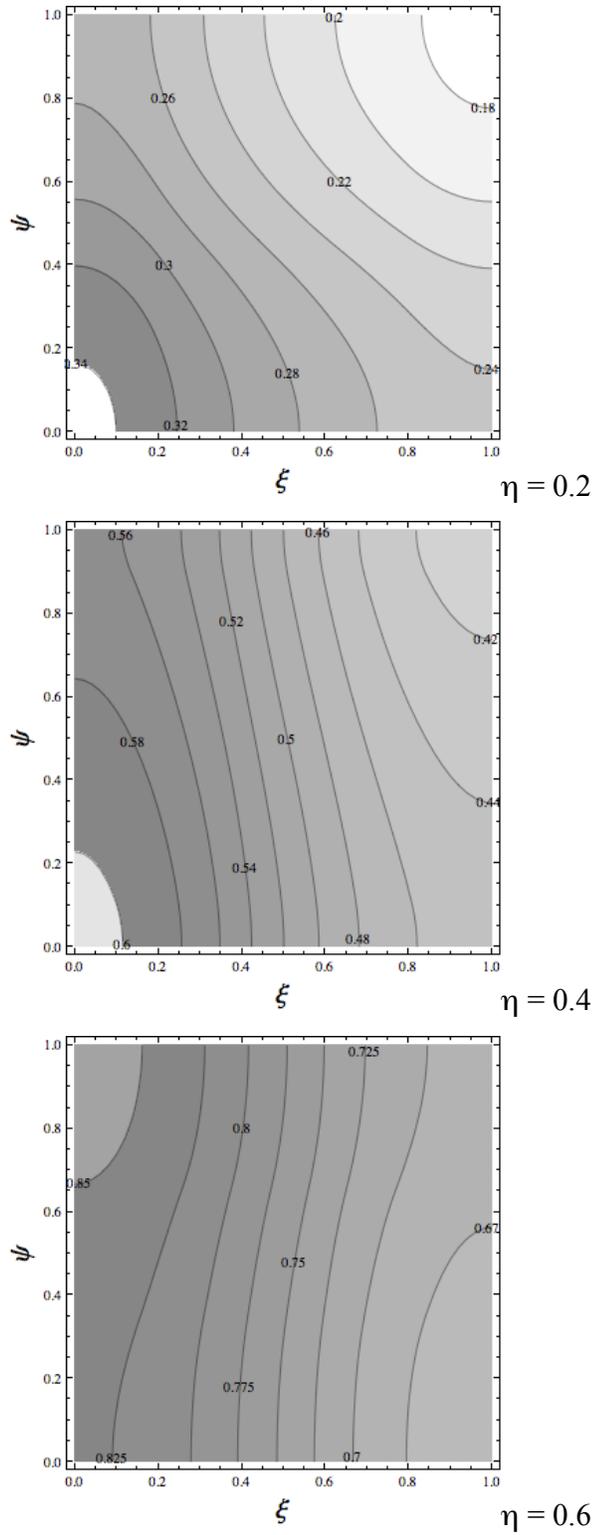


Figura 15. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=1$, $R=5$, $\eta=0.2$, 0.4 y 0.6 .

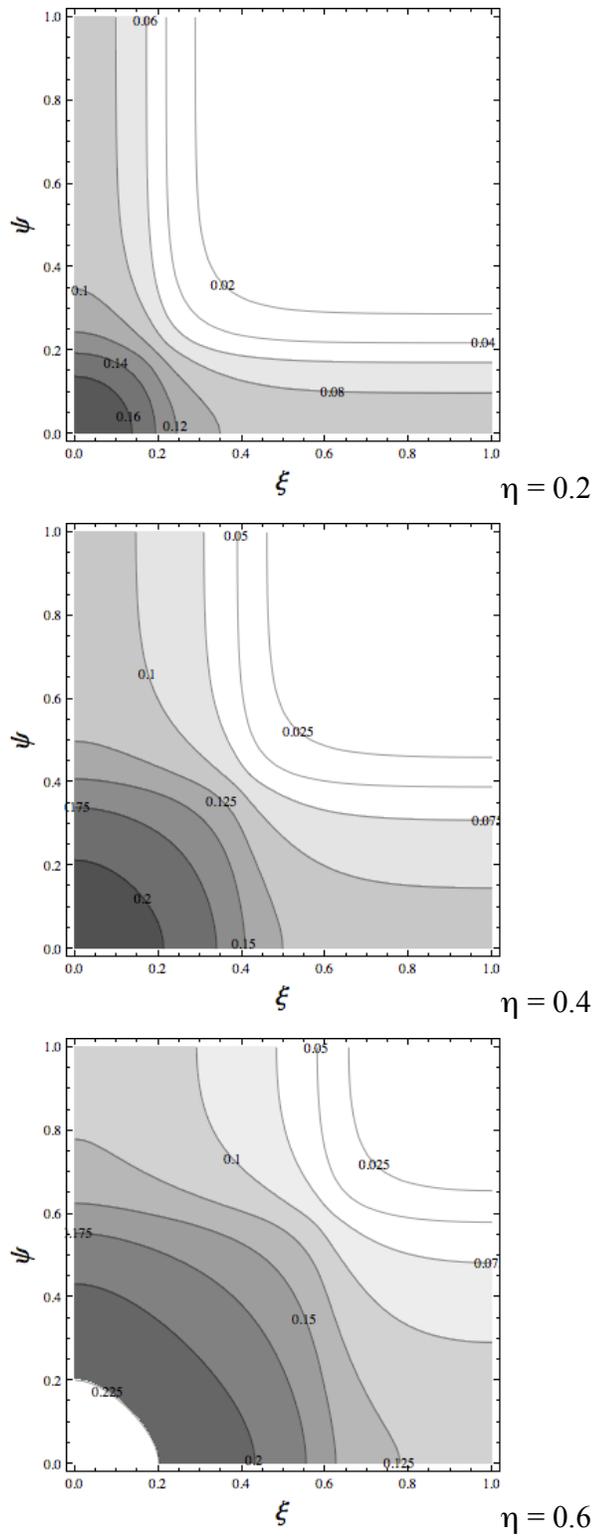


Figura 16. Distribuciones transitorias de temperatura adimensional (θ) para $\Lambda=1$, $a=1$, $b=10$, $R=1$, $\eta=0.2$, 0.4 y 0.6 .

4.-MODELO HIPERBÓLICO PARA EL MOVIMIENTO DE UNA POBLACIÓN DE BACTERIAS EN UN MEDIO POROSO ORTOTRÓPICO BIDIMENSIONAL.

4.1.-INTRODUCCIÓN

El estudio de las poblaciones de microorganismos es importante porque son la forma de vida más extendida y se les puede encontrar en una gran variedad de procesos industriales como la producción de fármacos, la rehabilitación de suelos contaminados así como el procesamiento de alimentos, entre muchos otros. Diferentes clases de microorganismos bacterianos poseen apéndices o extensiones en forma de cilios o vellosidades que utilizan para impulsarse en medios fluidos; en el caso de bacterias flageladas, el movimiento de un individuo está compuesto de recorridos cortos en línea recta aproximadamente, los cuales son interrumpidos por paros súbitos durante los que cambia su dirección. La trayectoria resultante es un recorrido aleatorio mientras que la migración macroscópica de toda la población es conocida como motilidad aleatoria. Este comportamiento puede ser modificado por diferentes estímulos en el medio ambiente; por ejemplo, las bacterias *Escherichia coli*, *Pseudomonas putida* y *Salmonella typhimurium*, son sensibles a los gradientes químicos que existen en sus ambientes y pueden ser atraídas hacia aminoácidos, carbohidratos y otros nutrientes benéficos; por otra parte, evitan ambientes con pH extremo y concentraciones altas de desechos metabólicos que pueden indicar la presencia de sobrepoblación. Este fenómeno biológico, conocido como quimiotaxis, es uno de los mecanismos más importantes en los procesos naturales de degradación en el medio ambiente, tratamientos de suelos y aguas contaminadas basados en microorganismos y extracción de hidrocarburos. Varios de tales procesos se llevan a cabo en medios porosos con fases fluidas estancadas; por ejemplo, la recuperación mejorada de hidrocarburos con base en bacterias la cual es utilizada para extraer el aceite atrapado en los poros de las rocas del yacimiento, y los tratamientos *in situ* que aplican microorganismos para degradar sustancias contaminantes en suelos y cuerpos de agua.

El modelo matemático de quimiotaxis más utilizado es el modelo clásico de Keller-Segel para el movimiento quimiosensitivo que fue establecido por Keller y Segel en 1970; estos investigadores estudiaron el comportamiento de las poblaciones de la amiba *Dictyostelium discoideum* [60]. Sin embargo, el modelo de Keller-Segel, el cual está basado en difusión, no es

físicamente adecuado para describir el movimiento de poblaciones de bacterias flageladas porque éste no es un movimiento browniano [36]; por otra parte, el modelo clásico presenta la desventaja de que predice una velocidad infinita para las perturbaciones que se propagan en un medio. Por lo anterior es importante investigar modelos alternativos para describir el movimiento de poblaciones de microorganismos; al respecto, Dolak y Hillen [37] han derivado modelos hiperbólicos para el movimiento quimiosensitivo basados en la ecuación de Maxwell-Cattaneo con el objetivo de describir cualitativamente experimentos de formación de patrones de crecimiento de la ameba *Dictyostelium discoideum* y la bacteria *Salmonella typhimurium* en cajas de petri con medio de agar semisólido. Filbet et al. [38] han propuesto un modelo hiperbólico para el movimiento quimiosensitivo a partir de la expansión de la ecuación de Chapman-Enskog y realizaron simulaciones numéricas para modelar el movimiento de células humanas endoteliales en matrigel (nombre comercial de un sustrato para el cultivo de células).

En este capítulo se aplica la ecuación de Maxwell-Cattaneo para modelar la difusión y crecimiento de una población de bacterias a través de un medio poroso anisotrópico y se verifica su validez física. Se introduce un tiempo característico de relajamiento para representar el tiempo de retraso entre el flujo de masa bacteriano y los gradientes de concentración de nutrientes y bacterias. La anisotropía del medio es caracterizada por medio de un tensor de difusión bacteriana (tensor de motilidad aleatoria). Para simplificar el análisis, se resuelve primero un sistema en una dimensión con información experimental reportada en la literatura [61]-[63]; posteriormente, se investiga un sistema anisotrópico bidimensional para evaluar el efecto de la anisotropía del medio. El análisis se enfoca en las escalas de tiempo y espacio donde la ecuación de Maxwell-Cattaneo predice perfiles de concentración de bacterias cualitativamente diferentes en comparación con el modelo clásico de Keller-Segel. El sistema en estudio consiste de la bacteria *E. coli* cepa RW262 la cual se mueve a través de un medio poroso lleno con una solución de galactosa (nutriente); la cepa considerada presenta quimiotaxis positiva hacia la galactosa y puede metabolizarla.

4.2.-MODELO MATEMÁTICO Y SOLUCIÓN

El sistema analizado fue seleccionado debido a la disponibilidad de datos experimentales los cuales se muestran en la Tabla I. Se considera en primer lugar un caso unidimensional y dos experimentos para evaluar las escalas de tiempo y longitud donde el modelo hiperbólico de quimiotaxis es físicamente válido. El experimento 1 representa una columna de arena llena con una solución de concentración uniforme inicial de nutriente (galactosa) y libre de bacterias; súbitamente, un extremo de la columna es mantenido con una concentración constante de bacterias. En el experimento 2 un volumen definido de una suspensión de bacterias de concentración inicial conocida es agregado a un extremo de la columna, lo cual es representado como una distribución inicial de concentración de bacterias.

Las ecuaciones de balance de masa para la población de bacterias y el nutriente son:

$$\frac{\partial B}{\partial T} + \nabla \cdot \mathbf{J}_B = R_B \quad (99)$$

$$\frac{\partial A}{\partial T} + \nabla \cdot \mathbf{J}_A = R_A \quad (100)$$

La variable B representa la concentración de bacterias, A es la concentración del nutriente, \mathbf{J} y R son el flux y el término de consumo y crecimiento, respectivamente; T es el tiempo. Las ecuaciones (99) y (100) representan un sistema de reacción-difusión porque se considera que el medio no se mueve.

Las expresiones correspondientes para los fluxes son:

$$\mathbf{J}_B + \tau \frac{\partial \mathbf{J}_B}{\partial T} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla B + \chi \frac{k_d}{(k_d + A)^2} B \nabla A \quad (101)$$

$$\mathbf{J}_A = -D \nabla A \quad (102)$$

En la ecuación (101) se introduce el modelo de Maxwell donde τ es el tiempo característico de relajamiento para una especie de bacteria en particular, el cual se puede considerar como un tiempo de retraso del flux de masa de bacterias con respecto a los gradientes de concentración de nutrientes y bacterias; μ es el tensor de motilidad aleatoria y es análogo al coeficiente de difusión molecular de las sustancias químicas, este término toma en cuenta el movimiento aleatorio de cada bacteria individual por medio de sus flagelos así como la anisotropía del medio. El parámetro χ es el coeficiente de sensibilidad quimiotáctica, k_d es una constante de equilibrio de disociación. Se supone que la concentración de nutriente (A) se difunde de acuerdo con la ley de Fick con el correspondiente coeficiente de difusión molecular D , esto se debe a que el fenómeno de relajamiento para la difusión de masa es menos significativo para moléculas pequeñas. Se considera también que todos los valores de los coeficientes de transporte utilizados en los cálculos de esta sección son valores efectivos ya que el modelo supone un medio poroso.

El crecimiento bacteriano y el consumo de nutriente están representados por el modelo de Monod [64]:

$$R_B = \frac{k_m A}{(k_s + A)} B \quad (103)$$

$$R_A = -\frac{k_m A}{\psi (k_s + A)} B \quad (104)$$

El parámetro k_m es la rapidez máxima de crecimiento específico y es un valor límite para altas concentraciones de nutriente; k_s es la constante media de saturación, esto es, la concentración de nutriente A tal que $R_B/B = k_m/2$. El consumo de nutriente está relacionado con el crecimiento de bacterias por medio de un coeficiente de eficiencia (ψ) que considera cuánta masa de nutriente se transforma en biomasa y se supone como constante.

Las condiciones iniciales y de frontera para los experimentos 1 y 2 están dadas por:

Experimento 1:

$$B(X,0) = 0 \quad , \quad \frac{\partial B}{\partial T}(X,0) = 0 \quad , \quad A(X,0) = A_0(X) \quad (105)$$

$$B(0,T > 0) = B_0 \quad , \quad \frac{\partial B}{\partial X}(L,T > 0) = 0 \quad , \quad \frac{\partial A}{\partial X}(0,T > 0) = \frac{\partial A}{\partial X}(L,T > 0) = 0 \quad (106)$$

Experimento 2:

$$B(X,0) = B_0(X) \quad , \quad \frac{\partial B}{\partial T}(X,0) = 0 \quad , \quad A(X,0) = A_0(X) \quad (107)$$

$$\frac{\partial B}{\partial X}(0,T > 0) = \frac{\partial B}{\partial X}(L,T > 0) = 0 \quad , \quad \frac{\partial A}{\partial X}(0,T > 0) = \frac{\partial A}{\partial X}(L,T > 0) = 0 \quad , \quad (108)$$

donde X es la coordenada a lo largo de la longitud de la columna de arena, L . Se definen las siguientes variables adimensionales para simplificar el análisis:

$$x = \frac{X}{L} \quad , \quad t = \frac{T\mu_X}{L^2} \quad , \quad b = \frac{B}{B_0} \quad , \quad a = \frac{A}{A_0} \quad , \quad \mathbf{J}_b = \frac{\mathbf{J}_B L}{\mu_X B_0} \quad , \quad \mathbf{J}_a = \frac{\mathbf{J}_A L}{DA_0} \quad (109)$$

$$o = \frac{k_m L^2}{\mu_X} \quad , \quad p = \frac{k_s}{A_0} \quad , \quad q = \frac{\mu_X \tau}{L^2} \quad , \quad r = \frac{k_d \mathcal{X}}{\mu_X A_0} \quad , \quad s = \frac{k_d}{A_0} \quad , \quad v = \frac{D}{\mu_X} \quad , \quad w = \frac{oB_0}{\psi A_0} \quad (110)$$

La coordenada adimensional, x , es normalizada con respecto a la longitud característica del sistema, L . El tiempo de referencia es el tiempo de difusión característico en dirección X , L^2/μ_X .

TABLA I. Parámetros utilizados con las ecuaciones (101)-(104) (Ref. [61]-[63]).

Parámetro	Valor
B_0	2.0×10^7 células/mL
τ	10 s ^a
μ_X	1.05×10^{-5} cm ² /s
D	1.61×10^{-6} cm ² /s
\mathcal{X}	8.40×10^{-5} cm ² /s
k_d	0.03 mM
k_s	0.03 mM
k_m	0.35 h ⁻¹
ψ	0.2

^aReferencia [37].

El parámetro o relaciona la rapidez máxima de crecimiento específico al tiempo de difusión y el parámetro q es la razón del tiempo de relajamiento característico al tiempo de difusión (tiempo de proceso); de esta forma, q es similar al número de Deborah que se utiliza en reología [65]. El sistema definido por las ecuaciones (99)-(104) se puede expresar en forma adimensional como:

$$\frac{\partial b}{\partial t} + \frac{\partial J_b}{\partial x} = o \frac{a}{(p+a)} b \quad (111)$$

$$J_b + q \frac{\partial J_b}{\partial t} = -\frac{\partial b}{\partial x} + \frac{r}{(s+a)^2} \frac{\partial a}{\partial x} b \quad (112)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + v \frac{\partial J_a}{\partial x} = -w \frac{a}{(p+a)} b \quad (113)$$

$$J_a = -\frac{\partial a}{\partial x} \quad (114)$$

Las ecuaciones anteriores se resolvieron expandiendo (111) y (112) (esquema de Lax-Wendroff [66]):

$$b(x, t + \Delta t) = b(x, t) + \Delta t \frac{\partial b(x, t)}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 b(x, t)}{\partial t^2} \quad (115)$$

$$J_b(x, t + \Delta t) = J_b(x, t) + \Delta t \frac{\partial J_b(x, t)}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 J_b(x, t)}{\partial t^2} \quad (116)$$

donde Δt es el incremento en el tiempo. Posteriormente las ecuaciones (113) y (114) son integradas utilizando la regla del trapecoide (método de Crank-Nicholson [66]):

$$a|_x^{t+\Delta t} - a|_x^t = \frac{\Delta t}{2} \left(v \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - w \frac{a}{(p+a)} b \right) \Big|_x^{t+\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} \left(v \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - w \frac{a}{(p+a)} b \right) \Big|_x^t \quad (117)$$

El sistema adimensional fue resuelto con diferentes valores de L y A_0 para investigar el efecto de la escala de longitud y la disponibilidad de nutrientes sobre los perfiles transitorios de concentración adimensional de bacterias y nutriente a través de las columnas de arena. Se

estudiaron dos casos límite de la función de Monod; el primer caso corresponde a un medio saturado con nutrientes, esto es, $a \gg p$ por lo que se supone que el consumo de a es despreciable y no hay efecto de quimiotaxis. En el segundo caso límite se considera la condición opuesta, $a \ll p$, de tal forma que se puede aproximar la función de Monod como $a/(p+a) \approx a/p$, y el efecto de quimiotaxis se hace más importante conforme el nutriente a es consumido y se establece un gradiente de concentración. Finalmente se muestra que el proceso de difusión bacteriana es más rápido que el crecimiento de la población por lo que es necesario suponer una distribución inicial de nutriente no uniforme para evaluar el efecto quimiotáctico.

4.3.-CASO LÍMITE $a \gg p$

En este caso límite se supone que la disponibilidad de nutriente es ilimitada y el consumo insignificante; como resultado, el gradiente de concentración de nutriente producido durante el proceso y el efecto quimiotáctico consecuente, son despreciables. La función de Monod es aproximada como $a/(p+a) \approx 1$; ésta es una buena aproximación para $a > 100p$ o $A > 3\text{mM}$, de acuerdo con las ecuaciones (109)-(110) y la Tabla I. Por ejemplo, la concentración inicial de nutriente en los experimentos de Sharma et al. [62] fue de 25mM. En la figura 17 se muestran los perfiles de concentración adimensional de bacterias (b) para el experimento 1(ecuaciones (105)-(106)), $q= 0.001$ ($L=0.324$ cm) y diferentes tiempos adimensionales ($t = 0.02, 0.04, 0.06, 0.08$ y 0.10). La concentración de bacterias se incrementa en forma monótona y no hay diferencias cualitativas con respecto al modelo clásico de Keller-Segel. Las longitudes típicas de las columnas de arena utilizadas como medios porosos en experimentos de migración de bacterias son de 8 a 10 cm. Cuando el parámetro q se incrementa a 0.01 es posible observar frentes de onda bien definidos que caracterizan a los procesos difusivos con tiempos de retraso, la longitud característica del sistema es $L= 0.102$ cm y el incremento monótono de la concentración de bacterias se mantiene. Para $q=0.1$ la onda de bacterias es reflejada en un extremo del sistema ($x=1$) y se pueden encontrar algunas regiones donde $b(x_1,t) > b(x_2,t)$ para $x_1 > x_2$, lo que es físicamente inviable para un proceso difusivo. Sin embargo, para $q=1$ la ecuación de Maxwell falla al predecir al interior del sistema concentraciones bacterianas mayores a la concentración de perturbación original. Esta paradoja física ha sido mencionada anteriormente por Taitel [45] en el estudio de la conducción hiperbólica de energía en sólidos rígidos. De acuerdo con los resultados

obtenidos, existe un intervalo de valores para el parámetro q , el tiempo adimensional de relajamiento, donde las predicciones de la ecuación de Maxwell son físicamente válidas y cualitativamente diferentes a las obtenidas con el modelo de Keller-Segel; para valores de q menores a 0.01, los perfiles de concentración de bacterias son de tipo difusivo clásico y; para valores superiores a 0.1, el modelo de Maxwell puede predecir resultados que no son válidos físicamente. Las escalas de longitud y tiempo correspondientes son 0.03 a 0.10 cm y 10 a 100 segundos, respectivamente; en esta escala de tiempo, el crecimiento de bacterias es insignificante y el proceso es controlado por la motilidad aleatoria.

En la figura 18 se presentan los resultados para el experimento 2, se adiciona en un extremo de la columna ($x=0$) un volumen finito de un cultivo de bacterias de concentración inicial b_0 . La condición inicial es aproximada por $b_0(x)=1-H(x-0.1)$, donde H es la función escalón de Heaviside y representa que el 10% de la longitud de la columna es llenado con la suspensión de bacterias. Para $q=0.001$ los perfiles de concentración son casi fickianos, excepto para $t=0.02$ y x cerca de 0, donde se puede observar un pequeño frente de onda. Para $q=0.01$ el pulso de concentración inicial se mueve a través de la columna con dos saltos de concentración hasta que desaparece en $t=0.10$. En la gráfica correspondiente a $q=0.1$ se aprecia un pulso más definido pero no se desvanece con el tiempo sino que se refleja en las fronteras del sistema.

La figura 19 muestra los perfiles adimensionales de concentración de bacterias cuando el volumen inicial de la suspensión de bacterias ocupa el 5% de la columna. Para $q=0.1$, la solución aparece como una onda viajera que se refleja en las fronteras del sistema. Esto indica que las condiciones iniciales y de frontera pueden afectar las predicciones físicas de la ecuación de Maxwell y se deben examinar los resultados en conjunto con el valor del parámetro q . Bajo la condición de un ambiente saturado con nutrientes, los principales mecanismos de transporte de bacterias son la motilidad aleatoria y el crecimiento de la población; por otra parte, el efecto del tiempo de relajamiento en los perfiles transitorios de concentración es significativo sólo a tiempos cortos cuando el crecimiento bacteriano es despreciable.

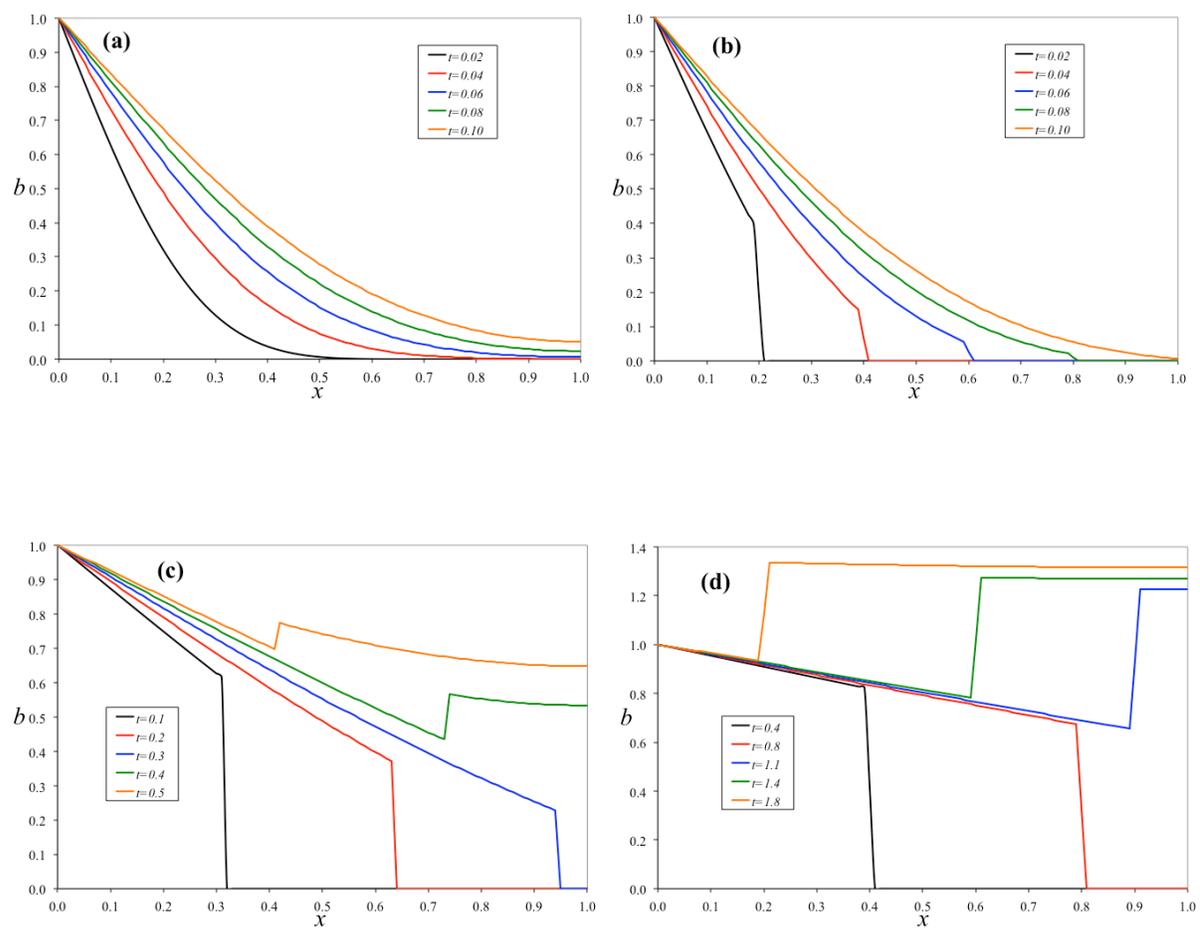


Figura 17. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \gg p$ (experimento 1) y diferentes valores del parámetro q . (a) $q=0.001$. (b) $q=0.01$. (c) $q=0.1$. (d) $q=1$.

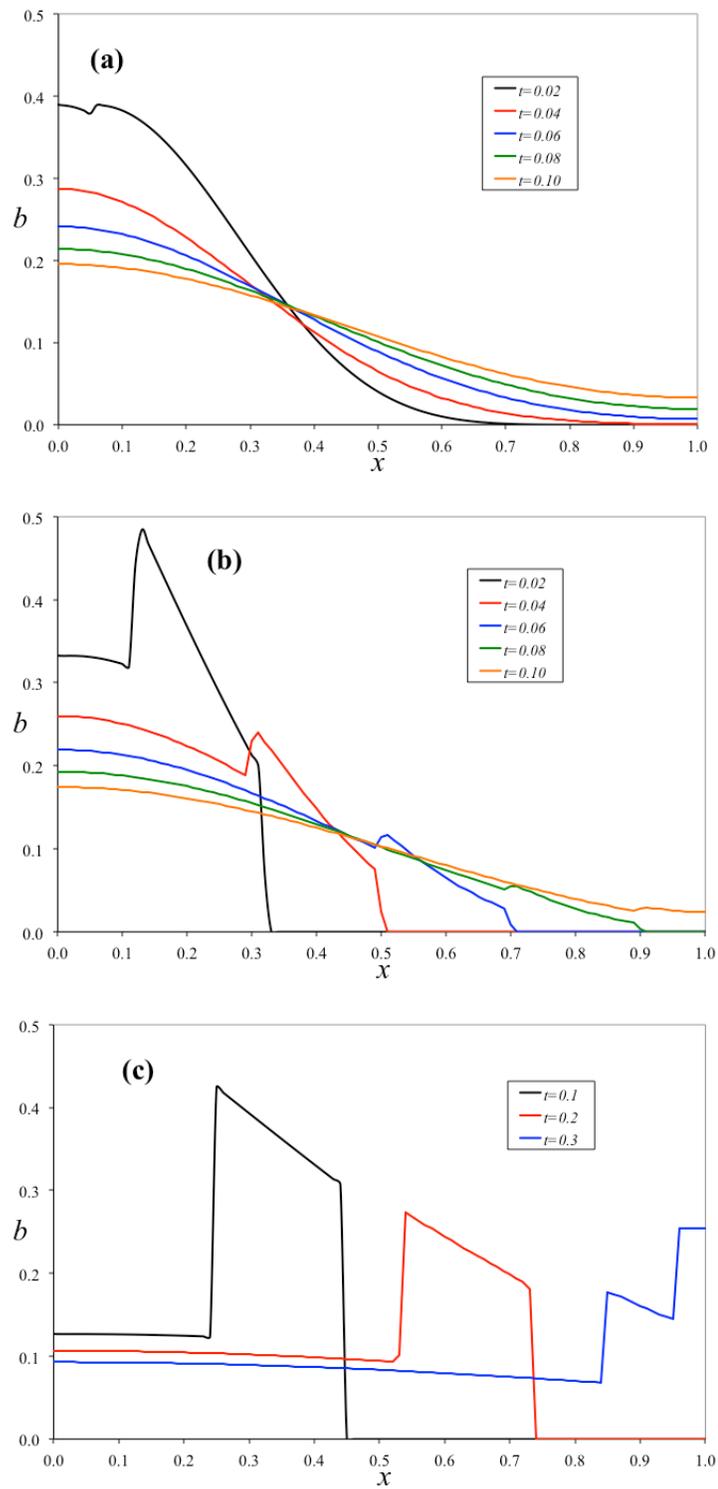


Figura 18. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \gg p$ (experimento 2), $b_0 = 1 - H(x - 0.1)$, y diferentes valores del parámetro q . (a) $q = 0.001$. (b) $q = 0.01$. (c) $q = 0.1$.

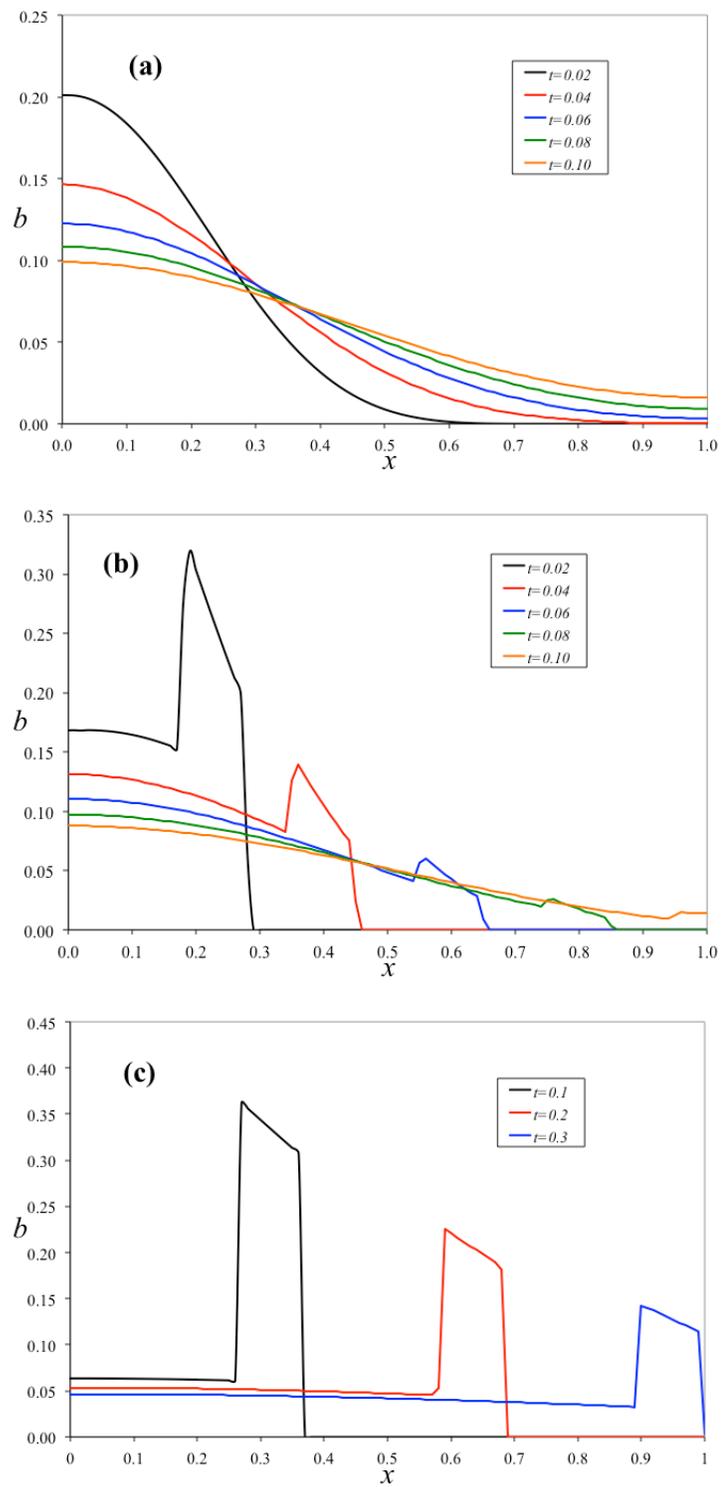


Figura 19. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \gg p$ (experimento 2), $b_0 = 1 - H(x - 0.05)$, y diferentes valores del parámetro q . (a) $q=0.001$. (b) $q=0.01$. (c) $q=0.1$.

4.4.-CASO LÍMITE $a \ll p$

En este caso la función de Monod es aproximada como $a/(p+a) \approx a/p$ y representa una baja disponibilidad de nutrientes. Esta condición de crecimiento es más distintiva de un medio ambiente natural donde los nutrientes son limitados. Se considera el consumo de nutriente y el consecuente efecto quimiotáctico. En la figura 20, se observa que la generación de un gradiente de concentración de nutriente es significativa sólo para $q=0.001$ mientras que para $q=0.01$ es casi despreciable. Estos resultados validan la hipótesis del caso $a \gg p$ donde se considera que no existe consumo de nutriente e indican que el efecto del tiempo de relajamiento es importante en escalas donde el crecimiento de bacterias no es significativo. Esta es una consecuencia directa de los valores de los parámetros k_m y τ , 9.7×10^{-5} s y 10 s, respectivamente. Un crecimiento de bacterias medible en medio poroso puede tomar tanto como 6 horas mientras que la población de bacterias se difunde a través de la columna con velocidad adimensional finita igual a $q^{-1/2}$ y el correspondiente tiempo de difusión $\tau q^{-1/2}$ (tiempo en el que el frente de onda de bacterias alcanza el extremo opuesto de la columna, $X=L$); para $q=1$ es 10 s y para $q=0.001$ es igual a 316 s, aproximadamente.

De acuerdo con los resultados antes mencionados, se propone una distribución inicial no uniforme de concentraciones de nutriente para evaluar el efecto quimiotáctico. La primera distribución de nutriente está representada por una función cóncava hacia arriba, la segunda es una línea recta y la última es una función cóncava hacia abajo; estas funciones están en orden ascendente con respecto al gradiente de concentración de galactosa. La figura 21 muestra los perfiles de concentración resultantes donde se observa que la principal diferencia se presenta para $t=0.02$. La figura 22 compara los perfiles de concentración de bacterias para $t=0.02$ y se puede notar que la concentración decrece conforme el gradiente de concentración de nutriente se incrementa antes del primer salto de concentración (en $x=0.1$), entre el primer y el segundo salto de concentración (entre $x=0.1$ y $x=0.3$) el resultado se invierte y el frente de onda tiene la misma velocidad en todos los casos.

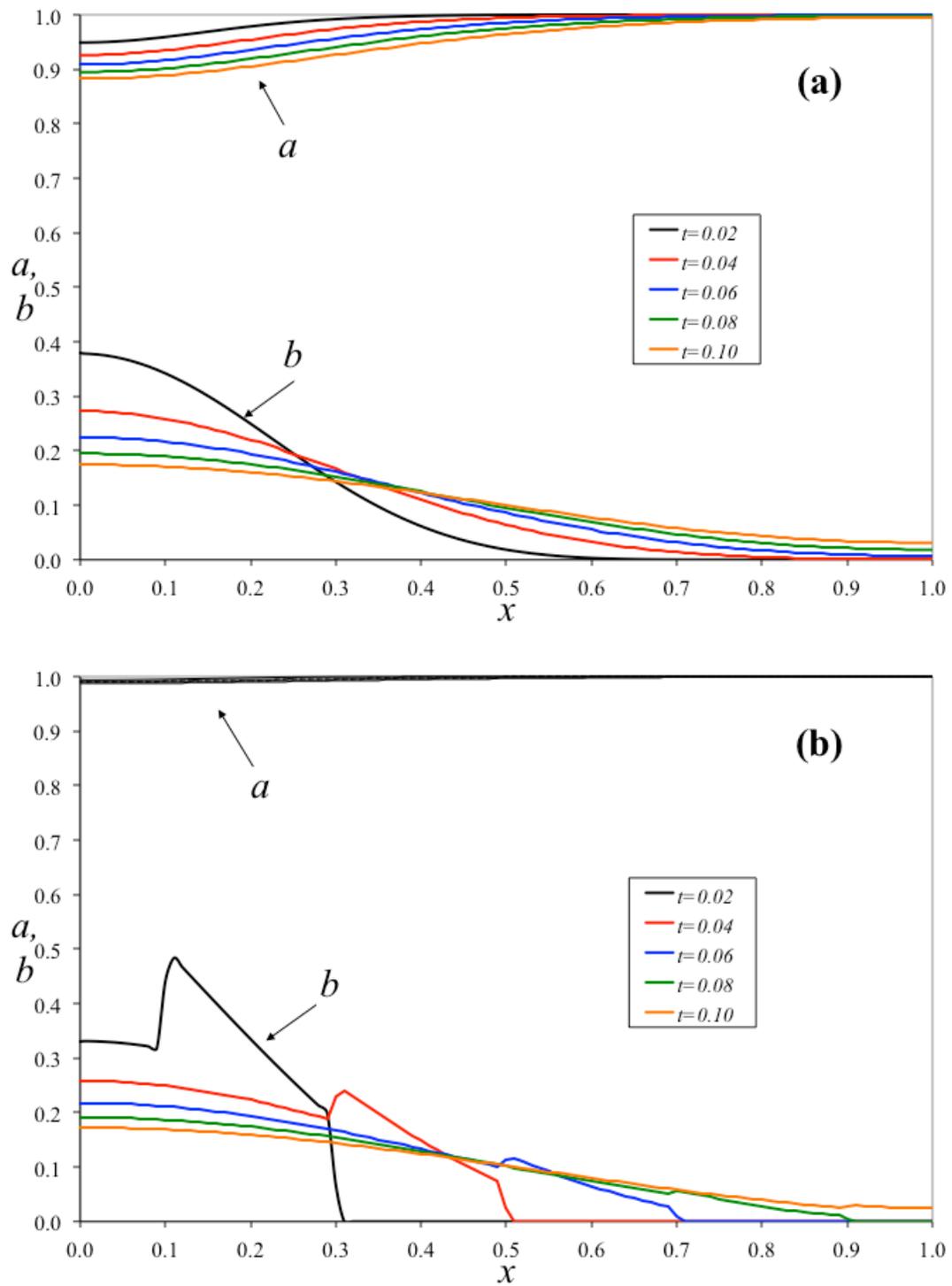


Figura 20. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \ll p$ (experimento 2), $b_0 = 1 - H(x - 0.1)$, $a_0(x) = 1$, y diferentes valores del parámetro q . (a) $q = 0.001$. (b) $q = 0.01$. (c) $q = 0.1$.

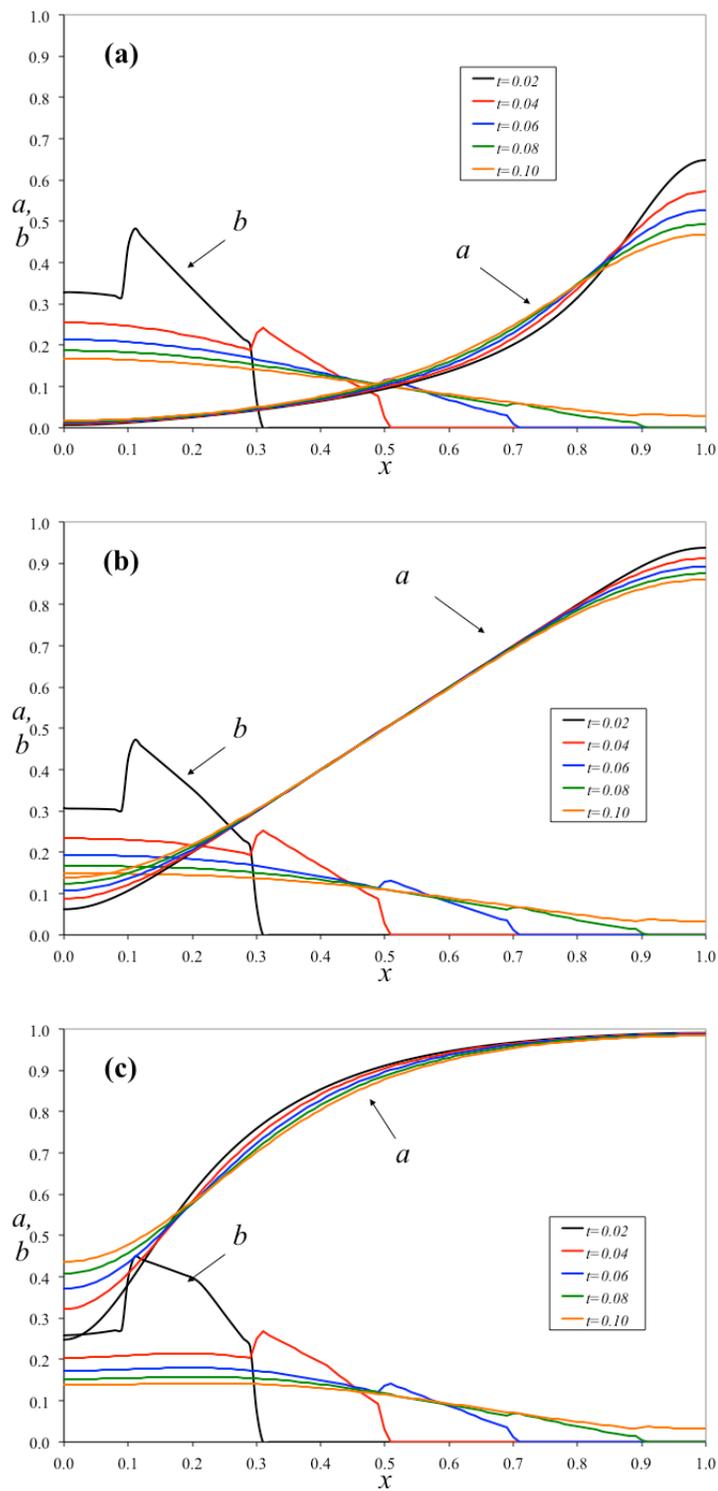


Figura 21. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \ll p$ (experimento 2), $b_0 = 1 - H(x - 0.1)$, $q = 0.01$, y diferentes perfiles iniciales de concentración de nutriente. (a) $a_0(x) = x/(10 - 9x)$. (b) $a_0(x) = x$. (c) $a_0(x) = 1 - \exp(-5x)$.

4.5.-SISTEMA BIDIMENSIONAL

Varios medios naturales y sintéticos donde los microorganismos pueden proliferar tienen propiedades anisotrópicas que pueden afectar el movimiento de las poblaciones al interior de estos sistemas. Para representar estas propiedades de los medios se introduce un tensor de motilidad aleatoria que está dado por:

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_x & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y & 0 \\ 0 & 0 & \mu_z \end{pmatrix}, \quad (118)$$

donde μ_x , μ_y y μ_z son las difusividades principales en dirección X , Y y Z , respectivamente. En esta sección se analiza cómo una población de bacterias migra a través de un medio poroso ortotrópico bidimensional de longitud L . El proceso se lleva a cabo en el plano X - Y y se desprecia el crecimiento de bacterias así como el efecto de quimiotaxis de acuerdo con los resultados preliminares del sistema unidimensional.

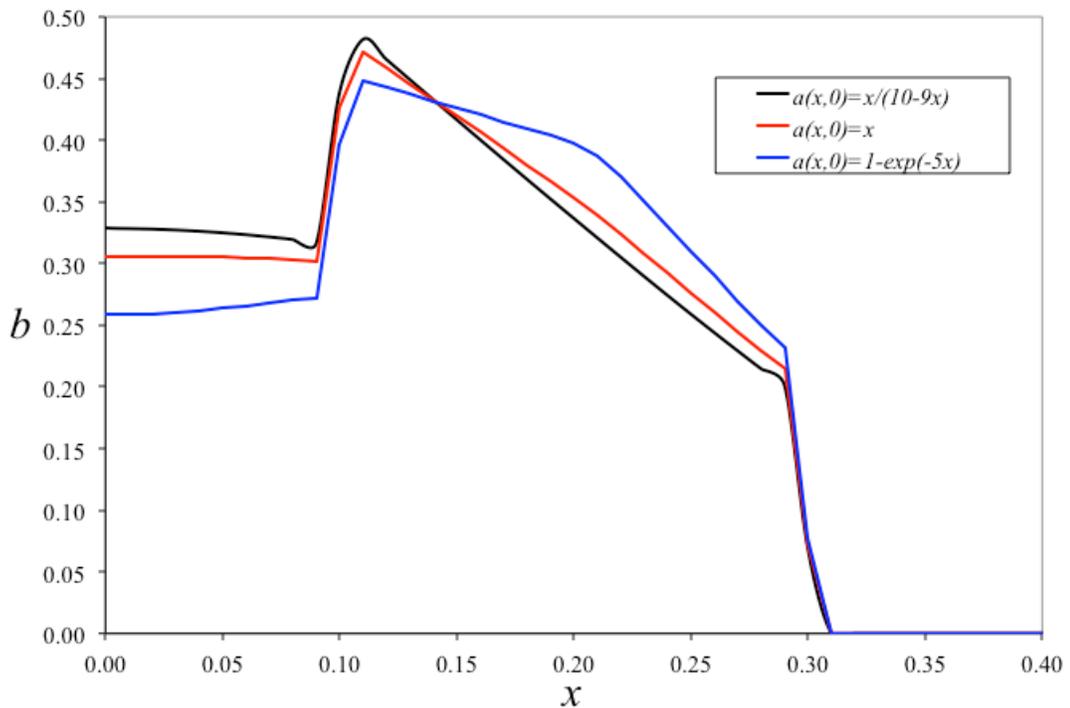


Figura 22. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $a \ll p$ (experimento 2), $b_0 = 1 - H(x - 0.1)$, $q = 0.01$, $t = 0.02$ y diferentes perfiles iniciales de concentración de nutriente.

Las condiciones iniciales y de frontera están definidas por :

$$B(\mathbf{r}, 0) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial B}{\partial T}(\mathbf{r}, 0) = 0 \quad (119)$$

$$B(\mathbf{r} = \Omega, T > 0) = B_0 \quad , \quad (120)$$

donde \mathbf{r} es el vector de posición y Ω es la frontera del sistema. La solución de las ecuaciones (99), (101) y (118)-(120) con $R_B=0$, se puede obtener por el método de separación de variables y se expresa en forma adimensional como:

$$b(x, y, t) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{nm} \theta_{nm}(t) \sin(n\pi x) \sin(m\pi y)$$

$$C_{nm} = \frac{4}{\theta_{nm}(0)} \left(\frac{1 - (-1)^n}{n\pi} \right) \left(\frac{1 - (-1)^m}{m\pi} \right)$$

$$\theta_{nm} = \begin{cases} \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(\exp\left(\frac{\sqrt{rad_{nm}} t}{2q}\right) + \left(\frac{\sqrt{rad_{nm}} - 1}{\sqrt{rad_{nm}} + 1}\right) \exp\left(\frac{-\sqrt{rad_{nm}} t}{2q}\right) \right) & \text{if } rad_{nm} > 0 \\ \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(\cos\left(\frac{\sqrt{-rad_{nm}} t}{2q}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{-rad_{nm}}}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{-rad_{nm}} t}{2q}\right) \right) & \text{if } rad_{nm} < 0 \\ \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(1 + \frac{t}{2q} \right) & \text{if } rad_{nm} = 0 \end{cases}$$

$$rad_{nm} = 1 - 4q\pi^2 (n^2 + hm^2)$$

(121)

La variable adimensional y está definida por Y/L y el parámetro h es la razón μ_Y/μ_X . La figura 23 muestra las distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para $q=0.01$, $h=1$ (medio isotrópico) y diferentes valores del tiempo adimensional ($t= 0.015$, 0.030 , 0.045 y 0.060). Se observan cuatro frentes de onda de masa de bacterias que se producen en las fronteras del sistema, estas ondas chocan y se suman entre ellas lo que da lugar a concentraciones que son mayores a la concentración inicial de perturbación, conforme avanza el tiempo de proceso las ondas se difunden y desaparecen los frentes bien definidos. De esta forma, la ecuación de Maxwell falla cuando los frentes de onda se encuentran entre sí o con las fronteras aisladas de un sistema porque el tiempo de retraso del flux no permite difundir suficientemente rápido la masa. La figura 24 muestra las distribuciones de concentración de bacterias para $q=0.01$ y $h=0.1$; como resultado, las ondas de masa de bacterias en dirección x viajan con una velocidad mayor que las ondas en dirección y . La anisotropía del medio produce un flujo preferencial de bacterias que a su vez da lugar a una región de baja concentración para $x \rightarrow 0$ y $x \rightarrow 1$, y otra región de alta concentración para $y \rightarrow 0$ y $y \rightarrow 1$ (esto es para $t=0.045$, antes de la colisión entre los frentes). La figura 25 muestra el caso opuesto, un material con una difusividad mayor en dirección y ($h=5$). De esta forma el comportamiento se invierte y las ondas de masa en dirección y son más rápidas.

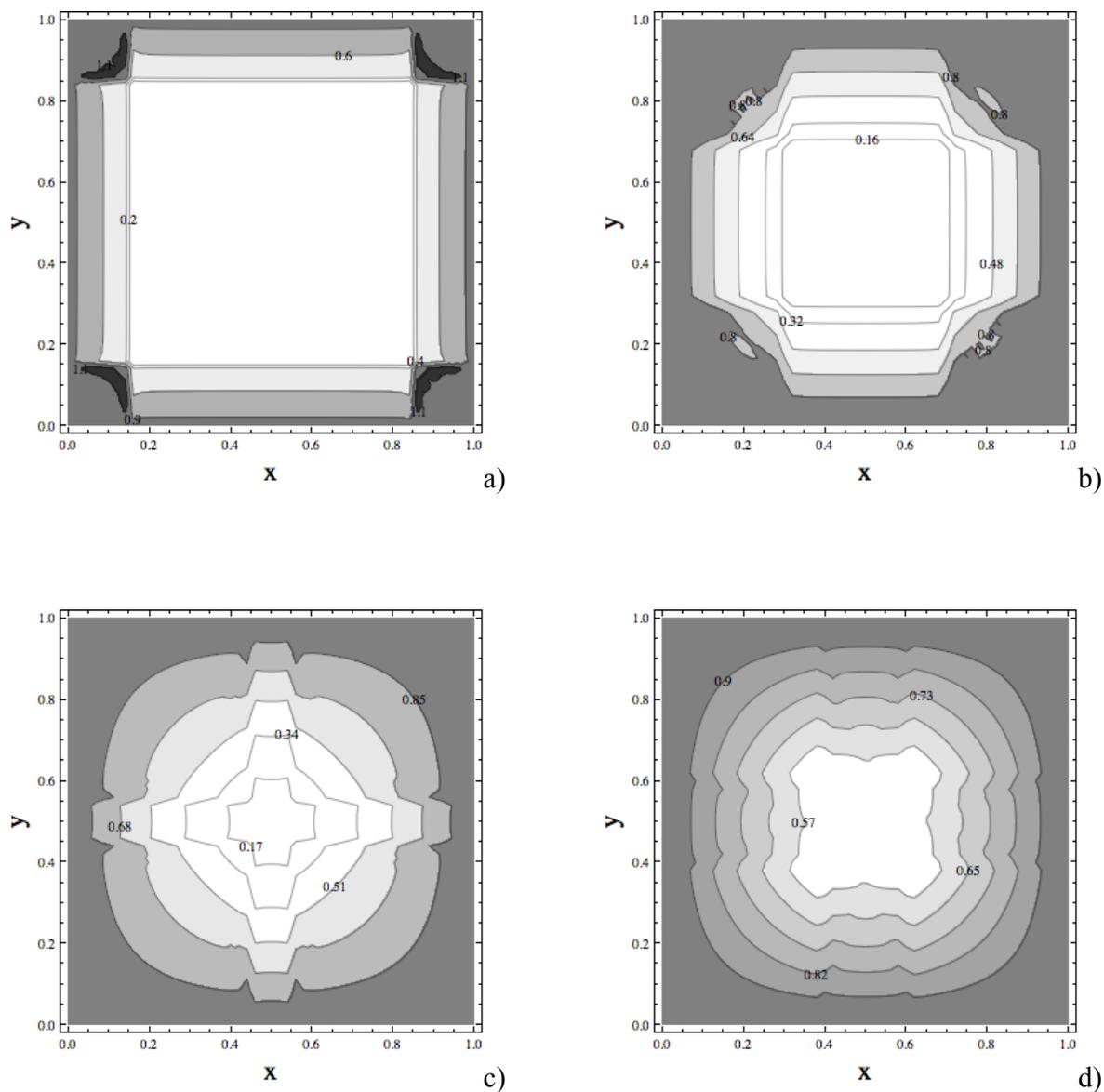


Figura 23. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (121)), $q=0.01$, $h=1$ (medio isotrópico) y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.015$. (b) $t=0.030$. (c) $t=0.045$. (d) $t=0.060$.

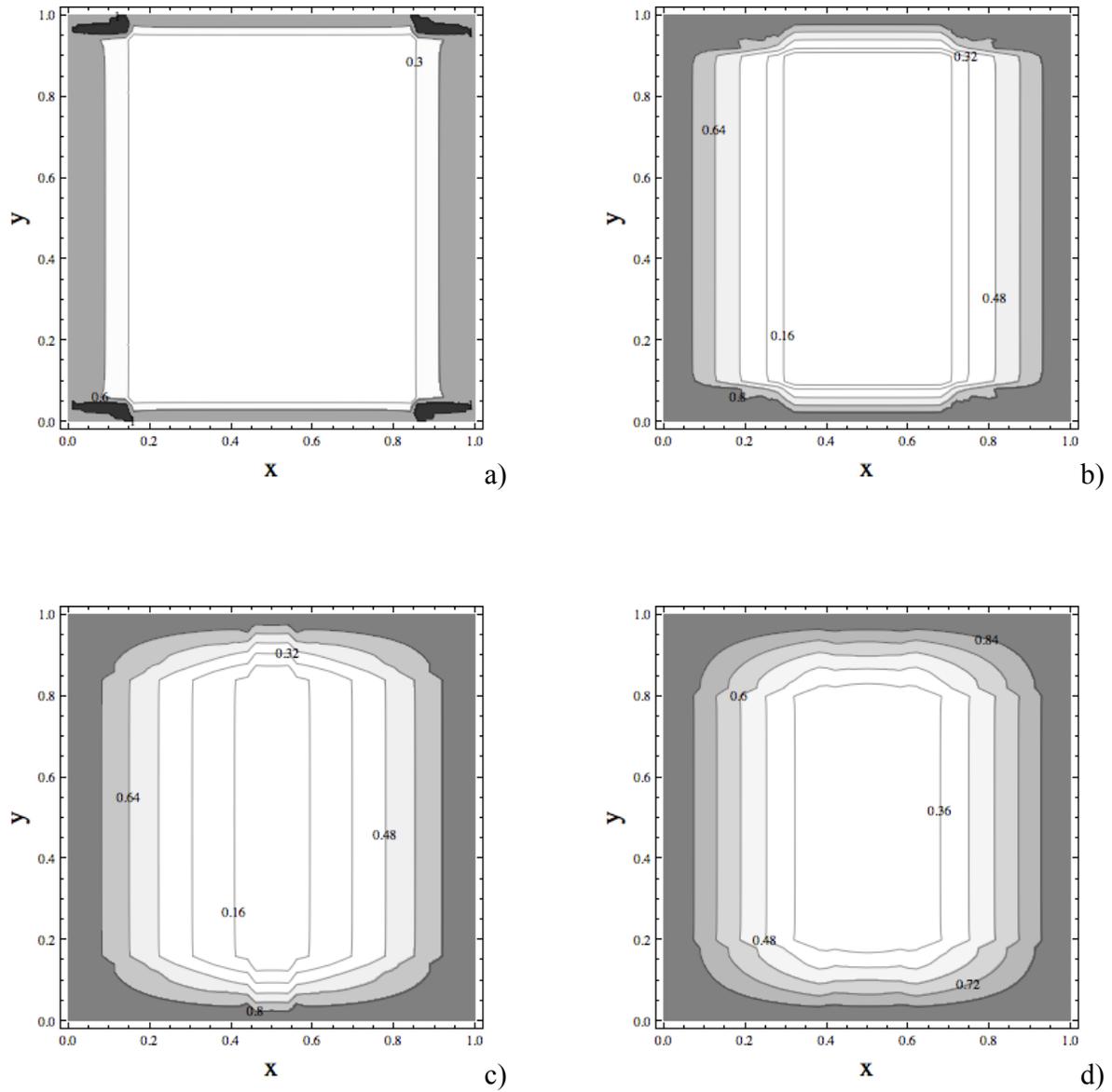


Figura 24. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (121)), $q=0.01$, $h=0.1$ y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.015$. (b) $t=0.030$. (c) $t=0.045$. (d) $t=0.060$.

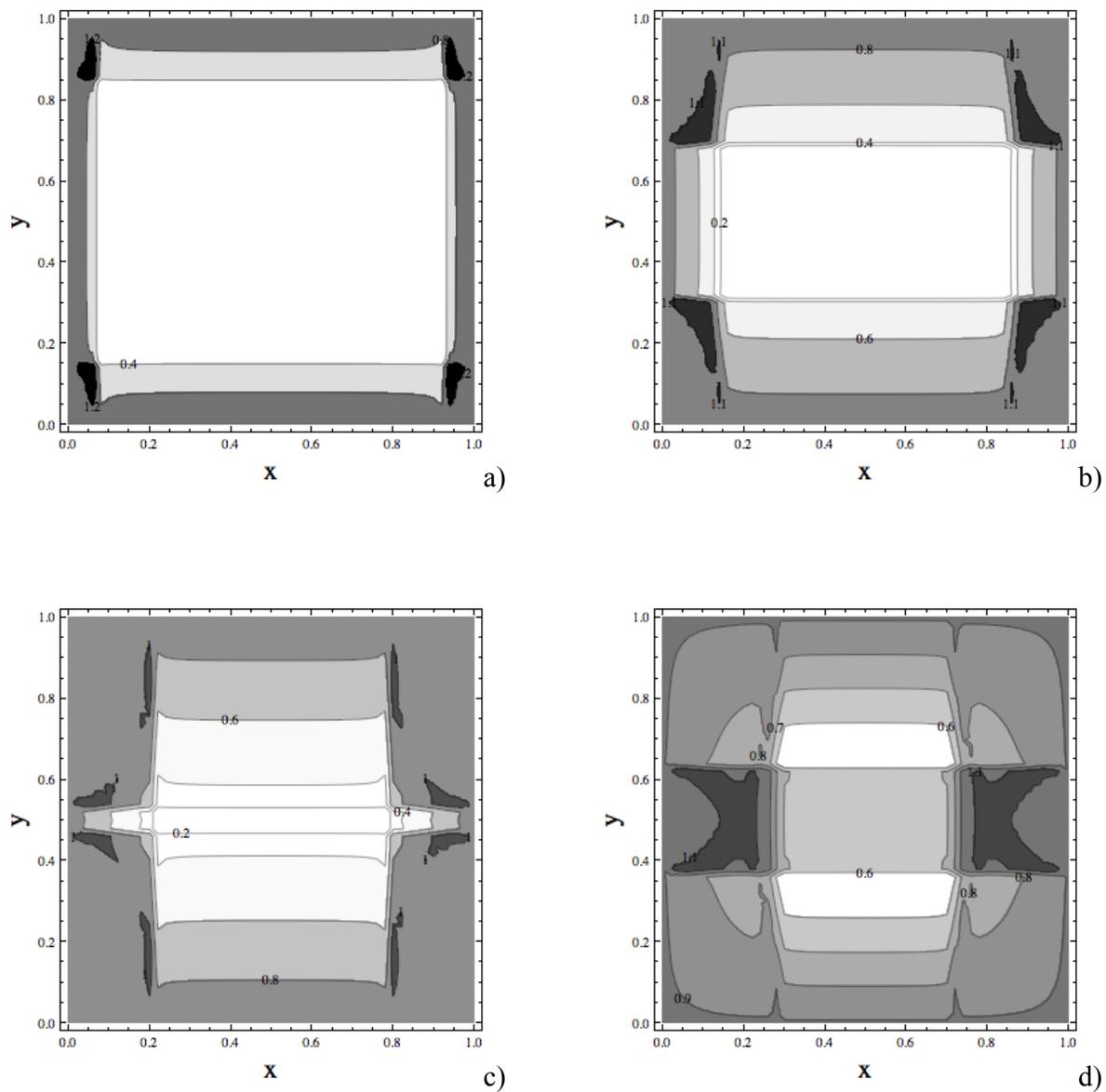


Figura 25. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (121)), $q=0.01$, $h=5$ y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.007$. (b) $t=0.014$. (c) $t=0.021$. (d) $t=0.028$.

Se considera ahora el caso de una distribución inicial de concentración de bacterias en el centro de una placa y su respectiva dispersión a través del medio, las condiciones iniciales y de frontera correspondientes son:

$$B(X,Y,0) = B_0(X,Y) \quad ; \quad \frac{\partial B}{\partial T}(X,Y,0) = 0 \quad (122)$$

$$B(0,Y,T > 0) = B(1,Y,T > 0) = B(X,0,T > 0) = B(X,1,T > 0) = 0 \quad , \quad (123)$$

donde $B_0(X,Y)$ es la distribución inicial. La solución analítica se puede obtener por método de separación de variables y está definida en forma adimensional por:

$$b(x,y,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{nm} \theta_{nm}(t) \sin(n\pi x) \sin(m\pi y)$$

$$C_{nm} = \frac{4 \int_0^1 \int_0^1 \sin(n\pi x) \sin(m\pi y) b_0(x,y) dx dy}{\theta_{nm}(0)}$$

$$\theta_{nm} = \begin{cases} \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(\exp\left(\frac{\sqrt{rad_{nm}} t}{2q}\right) + \left(\frac{\sqrt{rad_{nm}} - 1}{\sqrt{rad_{nm}} + 1}\right) \exp\left(\frac{-\sqrt{rad_{nm}} t}{2q}\right) \right) & \text{if } rad_{nm} > 0 \\ \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(\cos\left(\frac{\sqrt{-rad_{nm}} t}{2q}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{-rad_{nm}}}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{-rad_{nm}} t}{2q}\right) \right) & \text{if } rad_{nm} < 0 \\ \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(1 + \frac{t}{2q}\right) & \text{if } rad_{nm} = 0 \end{cases}$$

$$rad_{nm} = 1 - 4q\pi^2 (n^2 + hm^2) \quad (124)$$

En la figura 26 se representan las distribuciones de concentración adimensional para $q=0.017$, $h=1$ (medio isotrópico), $b_0=\exp(-80((x-0.5)^2+(y-0.5)^2))$ y diferentes valores de tiempo adimensional ($t=0.02$, 0.03 y 0.04). Se observa un frente de onda concéntrico que se mueve hacia las fronteras del sistema donde desaparece de acuerdo con las condiciones impuestas. En la figura 27 se muestran las distribuciones de concentración adimensional para $h=0.1$ y las mismas condiciones de la figura anterior.

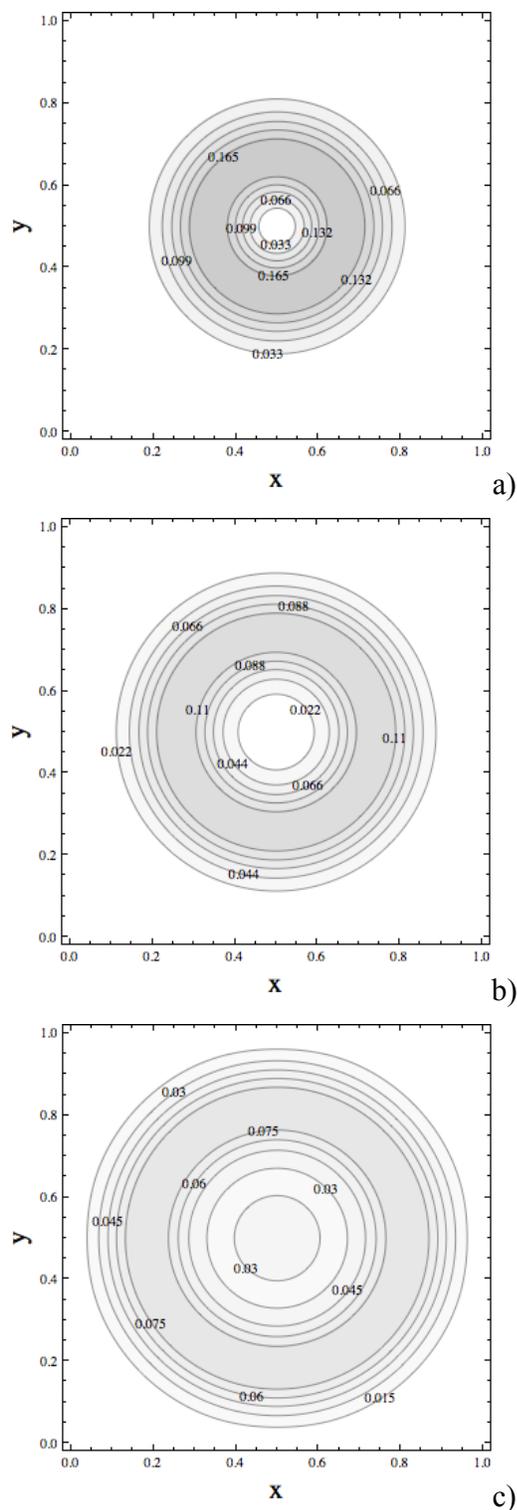


Figura 26. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (124)), $q=0.017$, $h=1$ (medio isotrópico) y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.02$. (b) $t=0.03$. (c) $t=0.04$.

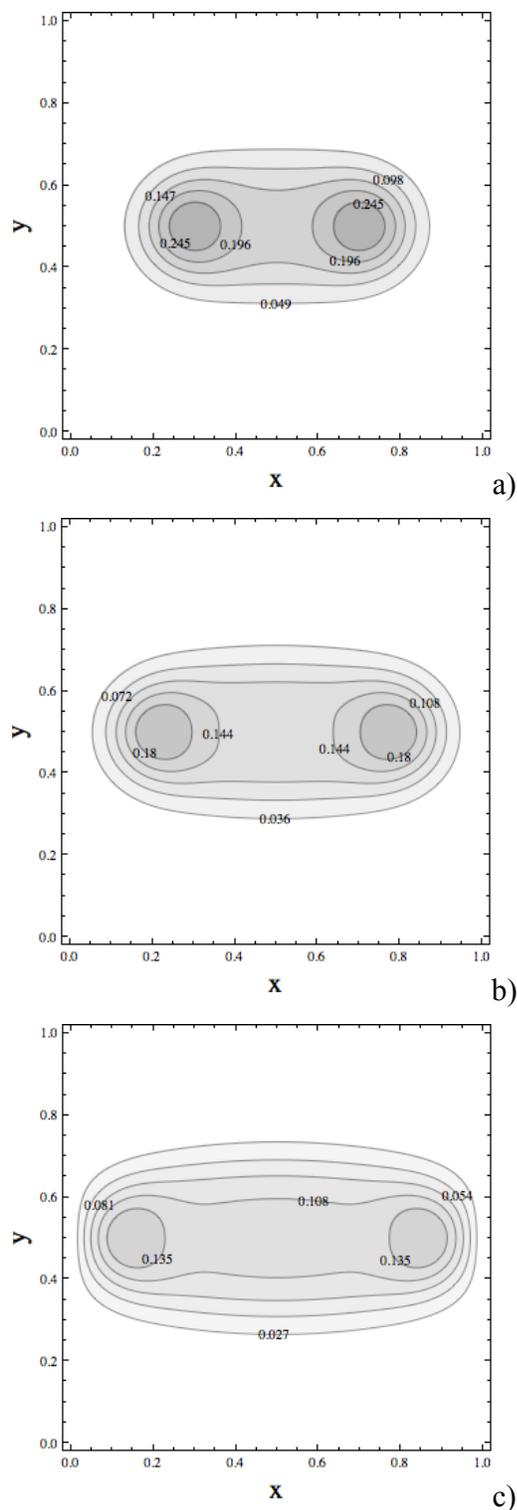


Figura 27. Distribuciones transitorias de concentración adimensional de bacterias para el sistema bidimensional (ecuación (124)), $q=0.017$, $h=0.1$ (medio anisotrópico) y diferentes tiempos adimensionales. (a) $t=0.03$. (b) $t=0.04$. (c) $t=0.05$

5.-CONCLUSIONES

Se realizó el estudio del flujo de energía y masa con relajamiento en medios anisotrópicos. Dos sistemas de interés práctico fueron analizados considerando un esquema matemático equivalente definido por la ecuación de transporte para la concentración de la propiedad (φ , ecuación 125) y la correspondiente ecuación constitutiva para el flux de dicha propiedad (\mathbf{q} , ecuación 126).

$$\partial\varphi/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{q} = S \quad (125)$$

$$\mathbf{q} + \tau \partial\mathbf{q}/\partial t = -\mathbf{D} \cdot \nabla\varphi \quad (126)$$

La función S representa un término fuente, τ es el tiempo de relajamiento característico del sistema y \mathbf{D} es el tensor de difusividades. Para el caso de energía φ es igual al producto de la densidad por la energía interna por unidad de masa del medio.

El primer sistema consistió del transporte de energía en un medio sometido a la irradiación de un láser de pulso corto, con aplicaciones biomédicas y en procesamiento de materiales. El segundo sistema describe el flujo de una población de bacterias a través de un medio anisotrópico, utilizado en procesos de biorremediación de suelos contaminados.

Para el primer sistema se presentó la interacción de ondas térmicas producidas por una fuente láser operada de forma continua en un medio ortotrópico. En primera instancia se consideró el problema en una dimensión y se obtuvo una solución numérica con el método de MacCormack, posteriormente se comparó con la solución analítica para verificar el esquema numérico. Finalmente, se resolvió el sistema bidimensional con el método numérico verificado y se evaluó el efecto del tiempo de relajamiento, anisotropía y coeficiente de absorción sobre las distribuciones de temperatura adimensionales. Los principales resultados son:

- La interacción de las ondas térmicas produce regiones de incrementos de temperatura máximos. Por lo tanto, es importante considerar la velocidad de propagación de la energía para evitar sobrecalentamientos indeseables durante el procesado de un material.

- La anisotropía del material genera un flujo preferencial de energía. Las ondas térmicas se propagan con mayor velocidad en la dirección de la conductividad térmica más alta.
- Los frentes de ondas térmicas se hacen más evidentes al incrementarse el coeficiente de absorción debido a que la difusión de energía controla el proceso y el término fuente es significativo cerca de la frontera irradiada únicamente.

Para el segundo sistema se presentó un modelo hiperbólico para la difusión y el crecimiento de una población de bacterias en un medio anisotrópico. La ecuación de Maxwell-Cattaneo se utilizó para modelar la difusión de bacterias y se consideraron dos casos límite de la función de Monod para incluir el crecimiento de la población. Se usó información reportada de experimentos de migración en medio poroso de la cepa de *Escherichia coli* RW262. En el primer caso límite, se supone que la disponibilidad del alimento (galactosa) no está acotada y se muestra que el efecto del tiempo característico de relajamiento es significativo para escalas del orden de 1mm o menores y tiempos de proceso de 100 s; por otra parte se encontró que para longitudes características del sistema del orden de 0.1mm y menores, la ecuación de Maxwell puede predecir distribuciones de concentración no válidas físicamente y que este resultado está relacionado con la paradoja de Taitel en el estudio de transporte de energía con relajamiento. En dichas circunstancias, el crecimiento bacteriano no es significativo y el efecto quimiotáctico puede influenciar la difusión sólo si un gradiente de concentración de nutriente se encuentra establecido.

Cuando la disponibilidad del nutriente está limitada, segundo caso límite, el consumo es también insignificante. Por lo anterior se presentó una solución analítica para la difusión bidimensional de una población de bacterias en un medio ortotrópico y se mostró que la anisotropía produce un flujo preferencial de masa, esta solución puede ser útil para verificar esquemas numéricos aplicados a sistemas hiperbólicos de migración de bacterias. De esta forma, el uso práctico de la ecuación de Maxwell está limitado a las escalas de longitud y tiempo arriba mencionadas en el caso del sistema analizado; por ejemplo, se podría utilizar para modelar la contaminación de superficies rugosas húmedas durante los primeros minutos o en otros sistemas con dimensiones de entre 1 y 0.3mm, aproximadamente.

BIBLIOGRAFÍA

- [1].- deGroot, S.R., Mazur, P., Non-equilibrium Thermodynamics, Dover Publications, New York, 1984.
- [2].- Kuiken, G. D. C., Thermodynamics of Irreversible Processes, Wiley, U.K., 1994.
- [3].- Öttinger, H.C., Beyond Equilibrium Thermodynamics, Wiley-Interscience, New Jersey, 2005
- [4].- García-Colín, L.S., “Extended non-equilibrium thermodynamics, scope and limitations”, *Revista Mexicana de Física* 34 No.3, p. 344-366, 1988.
- [5].- Joseph, D.D., Preziosi, L., “Heat waves”, *Rev. Modern Phys.*, Vol.61, p.41-73, 1989.
- [6].- Joseph, D.D., Preziosi, L., “Addendum to the paper: Heat waves”, *Rev. Modern Phys.*, Vol.62, p.375-391, 1990.
- [7].- Cattaneo, C., “A form of heat conduction equation which eliminates the paradox of instantaneous propagation”, *Compte Rendus*, Vol. 247, p. 431-433, 1958.
- [8].- Barletta, A., Zanchini, E., “Hyperbolic heat conduction and local equilibrium: a second law analysis”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.40, No.5, p.1007-1016, 1997.
- [9].- Criado-Sancho, M., Llebot, J.E., “Behavior of entropy in hyperbolic heat conduction”, *Phys. Rev. E*, Vol.47, No.6, 1993.
- [10].- Bai, C., Lavine, A.S., “On hyperbolic heat conduction and the second law of thermodynamics”, *Journal of Heat Transfer*, ASME Transactions, Vol.117, p.256-263, 1995.
- [11].- Guillemet, P., Bardon, J.P., Rauch, C., “Experimental route to heat conduction beyond the Fourier equation”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.40, No.17, p.4043-4053, 1997.
- [12].- Ordóñez-Miranda, J., Alvarado-Gil, J.J., “Thermal wave oscillations and thermal relaxation time determination in a hyperbolic heat transport model”, *International Journal of Thermal Sciences*, Vol.48, No.11, p.2053-2062, 2009.
- [13].- Beris, A.N., Edwards, B.J., *Thermodynamics of Flowing Systems with Internal Microstructure*, Oxford University Press, New York-Oxford, 1994.
- [14].- Özisik, M. N., Tzou, D.Y., “On the wave theory in heat conduction”, *Journal of Heat Transfer*, ASME Transactions, Vol.116, p.526-534, 1994.
- [15].- Peshkov, V., “Second Sound in He II”, *Journal of Physics*, URSS, Vol.8, p.381, 1944.

- [16].- Jackson, H. E., and Walker, C. T., “Thermal conductivity, second sound, and phonon-phonon interactions in NaF”, *Physical Review B*, Vol. 3, p.1428-1439, 1971.
- [17].- Narayanamurti, V. and Dynes, R. C., Observation of second sound in bismuth. *Physical Review Letters*, Vol. 28, p. 1561-1465, 1972.
- [18].- Kaminski, W., “Hyperbolic heat conduction equation for materials with a nonhomogeneous inner structure”, *ASME J. Heat Transfer*, Vol.112, p.555-560,1990.
- [19].- Mitra, K., Kumar, S., Vedavarz, A., Moallemi, M.K., ”Experimental evidence of hyperbolic heat conduction in processed meat”, *ASME J. Heat Transfer*, Vol.117, p.568,1995.
- [20].- Stritzker, B., Pospiesznyk, A., Tagle, J.A., “Measurement of lattice temperature of silicon during pulsed laser annealing”, *Physical Review Letters*, Vol. 47, No.5, p. 356-358, 1981.
- [21].- Tien, C.L., Qiu, T.Q., “Heat transfer mechanisms during short-pulse laser heating of metals”, *Journal of Heat Transfer ASME*, Vol. 115, No. 4, p. 835-841, 1993.
- [22].- Liu, L.H., Tang, H.P., Tong, T.W., “Non-Fourier effects on transient temperature response in semitransparent medium caused by laser pulse”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 44, No. 17, p. 3335-3344, 2001.
- [23].- Kulish, V.V., Novozhilov, V.B., ”An integral equation for the dual-lag model of heat transfer”, *ASME J. Heat Transfer*, Vol.126, p.805-808, 2004.
- [24].- Torii, S., Yang, W., “Heat transfer mechanisms in thin film with laser heat source”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 48, No. 3-4, p. 537-544, 2005.
- [25].- Abdallah, I.A., “Dual Phase Lag Heat Conduction and Thermoelastic Properties of a Semi-Infinite Medium Induced by Ultrashort Pulsed Laser”, *Progress in Physics*, Vol. 3, p. 60-63, 2009.
- [26].- Stratakis, E., Ranella, A., Farsari, M., Fotakis, C., “Laser-based micro/nanoengineering for biological applications”, *Progress in Quantum Electronics*, Vol.33, No.5, p.127-163, 2009.
- [27].- Wang, H., Ma, W., Zhang, X., Wang, W., Guo, Z., “Theoretical and experimental study on the heat transport in metallic nanofilms heated by ultra-short pulsed laser”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.54, No.4, p.967-974, 2011.
- [28].- Neogi, P., “Anomalous diffusion of vapors through solid polymers. I: Irreversible Thermodynamics of Diffusion and Solution Processes”, *AIChE Journal*, Vol.29, No.5, p.829, 1983.
- [29].- Neogi, P., “Anomalous diffusion of vapors through solid polymers. II: Anomalous Sorption”, *AIChE Journal*, Vol.29, No.5, p.833, 1983.

- [30].- Kim, M., Neogi, P., “Concentration-induced stress effects in diffusion of vapors through solid polymer membranes”, *J. Appl. Polym. Sci.*, Vol.29, p.731, 1984.
- [31].- Ocone, R., Astarita, G., “Continuous and discontinuous models for transport phenomena in polymers”, *AIChE Journal*, Vol.33, No.3, p.423, 1987.
- [32].- Camera-Roda, G., Sarti, G.C., “Mass transport with relaxation in polymers”, *AIChE Journal*, Vol.36, No.6, p.851, 1990.
- [33].- Abarzhi, I.I., “Wave mechanism of mass transfer for kinetics of adsorption in biporous media”, *Colloids and Surfaces A*, Vol. 164, p. 105-113, 2000.
- [34].- Aoki, K., “Diffusion-controlled current with memory”, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, Vol.592, p.31-36, 2006.
- [35].- Hadeler, K.P., “Reaction telegraph equations and random walks systems”, en S.J. vanStrien y S.M. Verduyn Lunel, editores, “Stochastic and Spatial Structures of Dynamical Systems. Royal Academy of the Netherlands, 1995.
- [36].- Hillen, T., “Hyperbolic models for chemosensitive movement”, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, Vol.12, No.7, p.1-28, 2002.
- [37].- Dolak, Y., Hillen, T., “Cattaneo models for chemosensitive movement. Numerical solution and pattern formation”, *J. Math. Biol.*, Vol.46, p.153-170, 2003.
- [38].- Filbet, F., Laurencot, P., Perthame, B., “Derivation of hyperbolic models for chemosensitive movement”, *J. Math. Biol.*, Vol.50, p.189-207, 2005.
- [39].- Balba, M.T., Al-Awadhi, N., Al-Daher, R., “Bioremediation of oil-contaminated soil: microbiological methods for feasibility assessment and field”, *Journal of Microbiological Methods*, Vol.32, No. 2, p.155-164, 1998.
- [40].- Eweis J., S. Ergas, D. Chag y E. Schoroeder. *Principios de Biorrecuperación*. MacGraw-Hill. España. 1ª Edición en Español. 1999.
- [41].- Saylor, G.S., Ripp, S., “Field applications of genetically engineered microorganisms for bioremediation processes”, *Current Opinion in Biotechnology*, Vol.11, No. 3, p.286-289, 2000.
- [42].- Boopathy, R., “Factors limiting bioremediation technologies”, *Bioresource Technology*, Vol.74, No. 1, p.63-67, 2000.
- [43].- Iwamoto, T., Nasu, M., “Current bioremediation practice and perspective”, *Journal of Bioscience and Biotechnology*, Vol.92, No. 1, p.1-8, 2001.

- [44].- Emtiazi, G., Shakarami, H., Nahvi, I., Mirdamadian, S.H., "Utilization of petroleum hydrocarbons by *Pseudomonas* sp. and transformed *Escherichia Coli*", *Afr. J. Biotechnol.*,4:172-176,2005.
- [45].- Taitel, Y., "On the parabolic, hyperbolic and discrete formulation of the heat conduction equation", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.15, p.369-371,1972.
- [46].- Barletta, A., Zanchini, E., "Unsteady heat conduction by internal energy waves in solids", *Phys. Rev. B*, Vol.55, No.21, 1997.
- [47].- Powers, J.M., "On the necessity of positive semi-definite conductivity and Önsager reciprocity in modeling heat conduction in anisotropic media", *ASME J. Heat Transfer*, Vol.126, p.670-675, 2004.
- [48].-Guan, K., Jiang, Y., Sun, C., Yu, H., "A two-layer model of laser interaction with skin: A photothermal effect analysis", *Optics & Laser Technology* 43 (3) (2011) 425-429.
- [49].- Zhang, D.M., Li, L., Li, Z.H., Guan, L., Tan, X., Liu, D., "Non-Fourier heat conduction studying on high-power short-pulse laser ablation considering heat source effect", *The European Physical Journal -Applied Physics* 33 (2) (2006) 91-96.
- [50].- Banerjee, A., Ogale, A.A., Das, C., Mitra, K., Subramanian, C., "Temperature distribution in different materials due to short pulse laser irradiation", *Heat Transfer Engineering*, Vol.26, No.8,p.41-49, 2004.
- [51].- W. Kim, K. Lee, Two-dimensional hyperbolic heat conduction in an orthotropic medium, *KSME Journal* 9 (2) (1995) 156-166.
- [52].- W. Shen, S. Han, Two-dimensional hyperbolic heat conduction with temperature-dependent properties, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer (Technical Note)* 18 (2) (2004) 285-287.
- [53].- C. Yang, Direct and inverse solutions of the two-dimensional hyperbolic heat conduction problems, *Applied Mathematical Modelling* 33 (6) (2009) 2907-2918.
- [54].- M. Naji, M. Al-Nimr, T. Darabseh, Thermal stress investigation in unidirectional composites under the hyperbolic energy model, *International Journal of Solids and Structures* 44 (16) (2007) 5111-5121.
- [55].- A.S. Zubair, M. A. Chaudhry, Heat conduction in a semi-infinite solid due to time-dependent laser source, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 39 (14) (1996) 3067-3074.

- [56].- D.E. Glass, M.N. Ozisik, D.S. McRae, B. Vick, On the numerical solution of hyperbolic heat conduction, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications* 8 (4) (1985) 497-504.
- [57].- D.E. Glass, M.N. Ozisik, D.S., McRae, B. Vick, Hyperbolic heat conduction with temperature-dependent thermal conductivity, *Journal of Applied Physics* 59 (6) (1986) 1861-1865.
- [58].- B. Pulvirenti, A. Barletta, E. Zanchini, Finite-difference solution of hyperbolic heat conduction with temperature-dependent properties, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications* 34 (2) (1998) 169–183.
- [59].- Mehrdad T. Manzari, Majid T. Manzari, On numerical solution of hyperbolic heat conduction, *Communications in Numerical Methods in Engineering* 15 (12) (1999) 853–866.
- [60].-Keller, E.F., Segel, L.A. 1970. Initiation of slime mold aggregation viewed as an instability. *J. Theor. Biol.* **26**(3): 399-415.
- [61].- Reynolds, P.J., Sharma, P., Jenneman, G.E., McInerney, M.J. 1989. Mechanisms of microbial movement in subsurface materials. *Appl. Environ. Microbiol.* **55**(9): 2280-2286.
- [62].- Sharma, P.K., McInerney, M.J., Knapp, M.R. 1993. In situ growth and activity and models of penetration of *Escherichia coli* in unconsolidated porous materials. *Appl. Environ. Microbiol.* **59**(11): 3686-3694.
- [63].- Barton, J.W., Ford, R.M. 1997. Mathematical model for characterization of bacterial migration through sand cores. *Biotechnol. Bioeng.* **53**(5): 487-496.
- [64].- Bailey, J.E., Ollis, D.F. 1986. *Biochemical engineering fundamentals*. 2nd edition. McGraw-Hill, New York.
- [65].- Macosko, C.W. 1994. *Rheology: principles, measurements, and applications*. Wiley-VCH, USA.
- [66].- LeVeque, R.J. 2007. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. SIAM, USA

APÉNDICE

La solución analítica del sistema unidimensional de la sección 3.2 se describe aquí. Combinando las ecuaciones (46) y (48) para el caso unidimensional, se tiene:

$$\Lambda \partial^2 \theta / \partial \eta^2 + \partial \theta / \partial \eta = \partial^2 \theta / \partial \xi^2 + a \exp(-b\xi) \quad (1A)$$

Se define el siguiente cambio de variable:

$$p = 1 - \xi \quad (2A)$$

Sustituyendo (2A) en la ecuación (1A):

$$\Lambda \partial^2 \theta / \partial \eta^2 + \partial \theta / \partial \eta = \partial^2 \theta / \partial p^2 + a \exp(-b(1-p)) \quad (3A)$$

Las condiciones iniciales y de frontera son:

$$\theta(p, 0) = 0 \quad (4A)$$

$$\partial \theta / \partial \eta(p, 0) = 0 \quad (5A)$$

$$\theta(0, \eta > 0) = 0 \quad (6A)$$

$$\partial \theta / \partial p(1, \eta > 0) = 0 \quad (7A)$$

La solución para θ se expresa como:

$$\theta(p, \eta) = W(p, \eta) + \theta_s, \quad (8A)$$

donde θ_s es la solución de θ en estado estacionario:

$$d^2 \theta_s / dp^2 + a \exp(-b(1-p)) = 0 \quad (9A)$$

$$\theta_s(0) = 0 \quad (10A)$$

$$d\theta_s/dp(1) = 0 \quad (11A)$$

Considerando las ecuaciones (9A)-(11A), θ_s está dado por:

$$\theta_s(p) = a(\exp(-b) + bp - \exp(-b(1-p)))/b^2 \quad (12A)$$

Las ecuaciones correspondientes para W son:

$$\Lambda \partial^2 W / \partial \eta^2 + \partial W / \partial \eta = \partial^2 W / \partial p^2 \quad (13A)$$

$$W(p,0) = -\theta_s(p) \quad (14A)$$

$$\partial W / \partial \eta(p,0) = 0 \quad (15A)$$

$$W(0,\eta > 0) = 0 \quad (16A)$$

$$\partial W / \partial p(1,\eta > 0) = 0 \quad (17A)$$

Finalmente, se utiliza el método de separación de variables para obtener la solución de W :

$$W(p,\eta) = \Xi(p)H(\eta) \quad (18A)$$

Sustituyendo la ecuación (18A) en (13A):

$$\Lambda \Xi d^2 H / d\eta^2 + \Xi dH / d\eta = H d^2 \Xi / dp^2 \quad (19A)$$

$$(d^2 \Xi / dp^2) / \Xi = -\beta^2 \quad (20A)$$

$$\Lambda (d^2 H / d\eta^2) / H + (dH / d\eta) / H = -\beta^2 \quad (21A)$$

El parámetro β es una constante.

La solución general de la ecuación (20A) es:

$$\Xi(p) = C_1 \sin(\beta p) + C_2 \cos(\beta p) \quad (22A)$$

Aplicando las ecuaciones (16A) y (17A) en (22A):

$$\Xi(p)_n = C_1 \sin(\beta_n p) \quad , \quad (23A)$$

con los valores propios:

$$\beta_n = \pi(1+2n)/2 \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (24A)$$

Para H se tiene:

$$d^2 H / d\eta^2 + (dH / d\eta) / \Lambda + \beta_n^2 H / \Lambda = 0 \quad (25A)$$

La solución general de H está dada por:

$$H(\eta)_n =$$

$$\exp(-\eta/2\Lambda) (C_3 \exp((rad_n)^{1/2} \eta / (2\Lambda)) + C_4 \exp(-(rad_n)^{1/2} \eta / (2\Lambda))) \quad \text{si } rad_n > 0$$

$$\exp(-\eta/2\Lambda) (C_3 \cos((-rad_n)^{1/2} \eta / (2\Lambda)) + C_4 \sin((-rad_n)^{1/2} \eta / (2\Lambda))) \quad \text{si } rad_n < 0$$

$$\exp(-\eta/2\Lambda) (C_3 + C_4 \eta) \quad \text{si } rad_n = 0$$

$$rad_n = 1 - \Lambda(1+2n)^2 \pi^2 \quad (26A)$$

Utilizando la ecuación (15A) en (18A):

$$dH_n(0)/d\eta = 0 \quad (27A)$$

Se puede simplificar la ecuación (26A):

$$H(\eta)_n =$$

$$\exp(-\eta/2\Lambda)(\exp((rad_n)^{1/2}\eta/(2\Lambda)) + (((rad_n)^{1/2}-1)/((rad_n)^{1/2}+1))\exp(-(rad_n)^{1/2}\eta/(2\Lambda)))$$

si $rad_n > 0$

$$\exp(-\eta/2\Lambda)(\cos((-rad_n)^{1/2}\eta/(2\Lambda)) + \sin((-rad_n)^{1/2}\eta/(2\Lambda))/(-rad_n)^{1/2})$$

si $rad_n < 0$

$$\exp(-\eta/2\Lambda)(1 + \eta/(2\Lambda))$$

si $rad_n = 0$

$$rad_n = 1 - \Lambda(1+2n)^2\pi^2 \quad (28A)$$

La expresión final para W es:

$$W(p, \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \sin(\pi(1+2n)p/2) H(\eta)_n \quad (29A)$$

Los coeficientes C_n se determinan usando la condición inicial, ecuación (14A), en combinación con las propiedades ortogonales de la función seno:

$$W(p, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \sin(\pi(1+2n)p/2) H(0)_n = -\theta_s(p) \quad (30A)$$

$$C_n = -2(\int_0^1 \sin(\pi(1+2n)p/2)\theta_s(p) dp) / H(0)_n \quad (31A)$$



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Applied Mathematical Modelling

journal homepage: www.elsevier.com/locate/apm

Hyperbolic model for bacterial movement through an orthotropic two-dimensional porous medium

R.M. Hernández^{a,*}, E. Rincón^b, R. Herrera^a, A.E. Chávez^a

^aDepartamento de Ingeniería Química, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria 04510, Distrito Federal, Mexico

^bDepartamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana Ciudad de México, Prolongación Paseo de la Reforma 880, Lomas de Santa Fe 01219, Distrito Federal, Mexico

ARTICLE INFO

Article history:

Received 20 September 2012

Received in revised form 29 August 2013

Accepted 22 July 2014

Available online xxx

Keywords:

Chemotaxis

Bacterial migration

Porous medium

Hyperbolic model

Anisotropic medium

ABSTRACT

In this paper an alternative hyperbolic model for bacterial movement is used to represent the migration of a bacterial population through an anisotropic porous medium filled with a nutrient. It is shown how this model can effectively reproduce bacterial wave fronts, which are observed in bacterial migration through porous media experiments. Time and length scales are defined where hyperbolic model preserves its physical validity and predicts very different bacterial concentration profiles in comparison with the classical Keller–Segel model for chemosensitive movement. Representative values of the hyperbolic model parameters are taken from experimental systems reported in literature and it is found that characteristic diffusion time is much smaller than characteristic growth time; in this way, the practical usefulness of the proposed model is limited to time scales when bacterial growth is negligible for the studied system. An analytical solution is presented and discussed for the two-dimensional diffusion of bacterial population within a square orthotropic porous medium, and it is shown that anisotropic properties of the medium lead to preferential bacterial flows.

© 2014 Elsevier Inc. All rights reserved.

1. Introduction

The study of populations of bacterial microorganisms is important at different levels, because they are the most extended life form and can be involved in industrial processes like medicines production, bioremediation of polluted soils and food processing as well. Several kinds of bacterial microorganisms are provided with threadlike appendages or extensions which are used for motion in fluid media; in the case of flagellated bacteria, the movement of an individual is composed of straight-line runs which are interrupted by breaks when bacteria modifies its direction, the resulting path is a random walk and the macroscopic spread of the whole population is named random motility. The above-mentioned behavior could be altered by the presence of different stimuli in the surroundings; for example, bacteria like *Escherichia coli*, *Pseudomonas putida* and *Salmonella typhimurium*, can sense chemical gradients in their environment and be attracted to amino acids, carbohydrates and other beneficial nutrients; whereas they avoid extreme pH and metabolic waste that could reveal the existence of overpopulation. This biological phenomenon, called chemotaxis, performs an important role in degradation processes in natural environment, oil extraction and biological based waste treatment technologies as well. Several of such processes take place inside porous media with stagnant fluid phase(s); for instance, the microbial enhanced oil recovery which is used to improve

* Corresponding author. Tel.: +52 55 63626954.

E-mail address: mhdzgz@gmail.com (R.M. Hernández).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2014.07.027>

0307-904X/© 2014 Elsevier Inc. All rights reserved.

the extraction of trapped oil in porous media and in situ bioremediation that applies microorganisms to degrade pollutants in the soils and surface or subsurface waters.

The most used model for chemotaxis is the classical Keller–Segel (KS) model for chemosensitive movement, which was established by Keller and Segel in 1970; they studied the aggregation behavior of the soil-living amoeba *Dictyostelium discoideum* [1]. KS model describes the movement process of bacterial population like a Brownian motion. Nevertheless, bacteria move in nearly straight-line, stop to change direction and continue the run in the new route. This characteristic movement is best described as a velocity jump process rather than a Brownian motion [2]. In addition, KS model presents the disadvantage of infinite speed of signal propagation. Therefore, it is justified to investigate alternative models for movement of bacterial populations; for example, Dolak and Hillen have derived models for chemosensitive movement based on Maxwell–Cattaneo’s law of heat propagation with finite speed to qualitatively describe pattern formation experiments with slime mold *D. discoideum* and bacteria *S. typhimurium* in petri dishes with semi-solid agar medium [3]. Filbet et al. derived hyperbolic models for chemosensitive movements through a Chapman–Enskog expansion and performed numerical simulations to model experiments with human endothelial cells on matrigel [4].

The Maxwell–Cattaneo (MC) equation has been extensively used to model a variety of energy and mass transfer processes as an alternative to classical diffusion laws of Fourier and Fick [5–7]. The main feature of MC equation is the prediction of finite speed of signal propagation through a medium, which avoids the inherent and nonphysical infinite speed of classical diffusion models. The coupling of MC equation with the corresponding balance equation leads to a hyperbolic differential equation that describes the time evolution of property concentration (energy or mass); for this reason, an energy transfer process is called hyperbolic heat conduction when MC equation is considered [8]. However, the MC equation’s validity is still under debate because many researchers have presented evidence in behalf of [9–11] and against it [12–15]. The arguments are both theoretical and experimental, while the principal issue is the lack of experimentally measured values of relaxation time parameters [16,17].

In this paper we apply the MC equation to model the diffusion and growth of a bacterial population through an anisotropic porous medium and verify its physical validity. The objective of this work is the qualitative analysis of the proposed model rather than a quantitative description of any experimental system. A characteristic relaxation time is introduced to represent the delay time between the bacterial mass flux and the bacterial and nutrient concentration gradients, and the medium anisotropy is characterized with a bacterial diffusion tensor (random motility tensor). First, to simplify the analysis, a one-dimensional system is considered and we use experimental data from studies reported in literature [18,19]; then an anisotropic two-dimensional case is investigated to evaluate the effect of the anisotropy of the medium. Specially, we focus on length and time scales where the MC equation predicts very different bacterial concentration profiles in comparison with the classical Keller–Segel model. The analyzed system has been studied both experimentally and theoretically [20], and consists of the bacteria *E. coli* strain RW262, which moves through a porous medium (sand column) filled with galactose (nutrient). The considered strain presents positive chemotaxis towards galactose and can metabolize it. Later, it is shown that diffusion time scale is much smaller than growth time scale; thus, we present an analytical solution for diffusion of bacteria with relaxation in a porous square orthotropic medium.

2. Mathematical model and solution

The analyzed system was selected because the availability of experimental data which are shown in Table 1. First, we consider a one-dimensional case and two experiments to evaluate time and length scales where hyperbolic chemotaxis model is physically valid. Experiment 1 represents a sand column filled with an initial uniform concentration of nutrient (galactose) and total absence of bacteria; suddenly, an end of the column is maintained with a constant concentration of bacteria. In Experiment 2 an amount of bacterial solution of known concentration is added to an extreme of the column and this is represented like an initial bacterial concentration profile.

The mass balance equations for bacterial population and nutrient are:

$$\frac{\partial B}{\partial T} + \nabla \cdot \mathbf{J}_B = R_B, \quad (1)$$

Table 1
Parameter values used to solve Eqs. (1)–(6) [3,20].

Parameter	Value
B_0	2.0×10^7 cells/mL
τ	10 s
μ_x	1.05×10^{-5} cm ² /s
D	1.61×10^{-6} cm ² /s
χ	8.40×10^{-5} cm ² /s
k_d	0.03 mM
k_s	0.03 mM
k_m	0.35 h^{-1}
ψ	0.2

$$\frac{\partial A}{\partial T} + \nabla \cdot \mathbf{J}_A = R_A. \quad (2)$$

The variable B represents the bacterial concentration, A is the nutrient concentration, \mathbf{J} and R are the flux and the reaction term, respectively; T is the time. The medium does not move then Eqs. (1) and (2) represent a reaction–diffusion system.

The corresponding flux expressions are:

$$\mathbf{J}_B + \tau \frac{\partial \mathbf{J}_B}{\partial T} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla B + \chi \frac{k_d}{(k_d + A)^2} B \nabla A, \quad (3)$$

$$\mathbf{J}_A = -D \nabla A. \quad (4)$$

In Eq. (3) we introduce the MC flux equation where τ is a relaxation characteristic time of a specific bacterial kind, which could be considered as a delay time of bacterial mass flux with respect to bacterial and nutrient concentration gradients; $\boldsymbol{\mu}$ is the random motility tensor which is analogous to molecular diffusion coefficient of substances, this term takes account of random movement of individual bacteria by means of their flagella as well as the anisotropy of the medium; χ is the chemotactic sensitivity coefficient, k_d is an equilibrium dissociation constant. We assume Fickian diffusion for A , the nutrient concentration, with the corresponding molecular diffusion coefficient, D ; this is because relaxational phenomena for mass diffusion are negligible for small molecules. In addition, it must be mentioned that all the values of the transport coefficients used in calculations are the effective values, because the model supposes a porous medium.

Bacterial growth and nutrient consumption are represented by Monod model [21]:

$$R_B = \frac{k_m A}{(k_s + A)} B, \quad (5)$$

$$R_A = -\frac{k_m A}{\psi(k_s + A)} B. \quad (6)$$

The parameter k_m is the maximum specific growth rate and is a limiting value for high nutrient concentrations; k_s is the half saturation constant, that is, the A value that corresponds to $R_B/B = k_m/2$. The nutrient consumption is related with bacterial growth through a yield coefficient (ψ) that takes into consideration how much nutrient mass becomes biomass and it is assumed like a constant. The corresponding initial and boundary conditions for Experiments 1 and 2 are given by:

Experiment 1:

$$B(X, 0) = 0, \quad \frac{\partial B}{\partial T}(X, 0) = 0, \quad A(X, 0) = A_0(X), \quad (7)$$

$$B(0, T > 0) = B_0, \quad \frac{\partial B}{\partial X}(L, T > 0) = 0, \quad \frac{\partial A}{\partial X}(0, T > 0) = \frac{\partial A}{\partial X}(L, T > 0) = 0. \quad (8)$$

Experiment 2:

$$B(X, 0) = B_0(X), \quad \frac{\partial B}{\partial T}(X, 0) = 0, \quad A(X, 0) = A_0(X), \quad (9)$$

$$\frac{\partial B}{\partial X}(0, T > 0) = \frac{\partial B}{\partial X}(L, T > 0) = 0, \quad \frac{\partial A}{\partial X}(0, T > 0) = \frac{\partial A}{\partial X}(L, T > 0) = 0, \quad (10)$$

where X is the coordinate along the length of the sand column, L . To simplify the analysis, the below dimensionless quantities are introduced:

$$x = \frac{X}{L}, \quad t = \frac{T \mu_X}{L^2}, \quad b = \frac{B}{B_0}, \quad a = \frac{A}{A_0}, \quad \mathbf{J}_b = \frac{\mathbf{J}_B L}{\mu_X B_0}, \quad \mathbf{J}_a = \frac{\mathbf{J}_A L}{D A_0}, \quad (11)$$

$$o = \frac{k_m L^2}{\mu_X}, \quad p = \frac{k_s}{A_0}, \quad q = \frac{\mu_X \tau}{L^2}, \quad r = \frac{k_d \chi}{\mu_X A_0}, \quad s = \frac{k_d}{A_0}, \quad v = \frac{D}{\mu_X}, \quad w = \frac{o B_0}{\psi A_0}. \quad (12)$$

The dimensionless coordinate, x , is normalized with respect to the characteristic length of the system (sand column), L . The reference time is the characteristic diffusion time in X -direction, L^2/μ_X . The parameter o relates the maximum specific growth rate to diffusion time whereas parameter q is the ratio of the characteristic relaxation time to diffusion time (process time); in this way, q is similar to Deborah number used in rheology [22]. Thus, the system (1)–(6) in one-dimension can be written as:

$$\frac{\partial b}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{J}_b}{\partial x} = o \frac{a}{(p + a)} b, \quad (13)$$

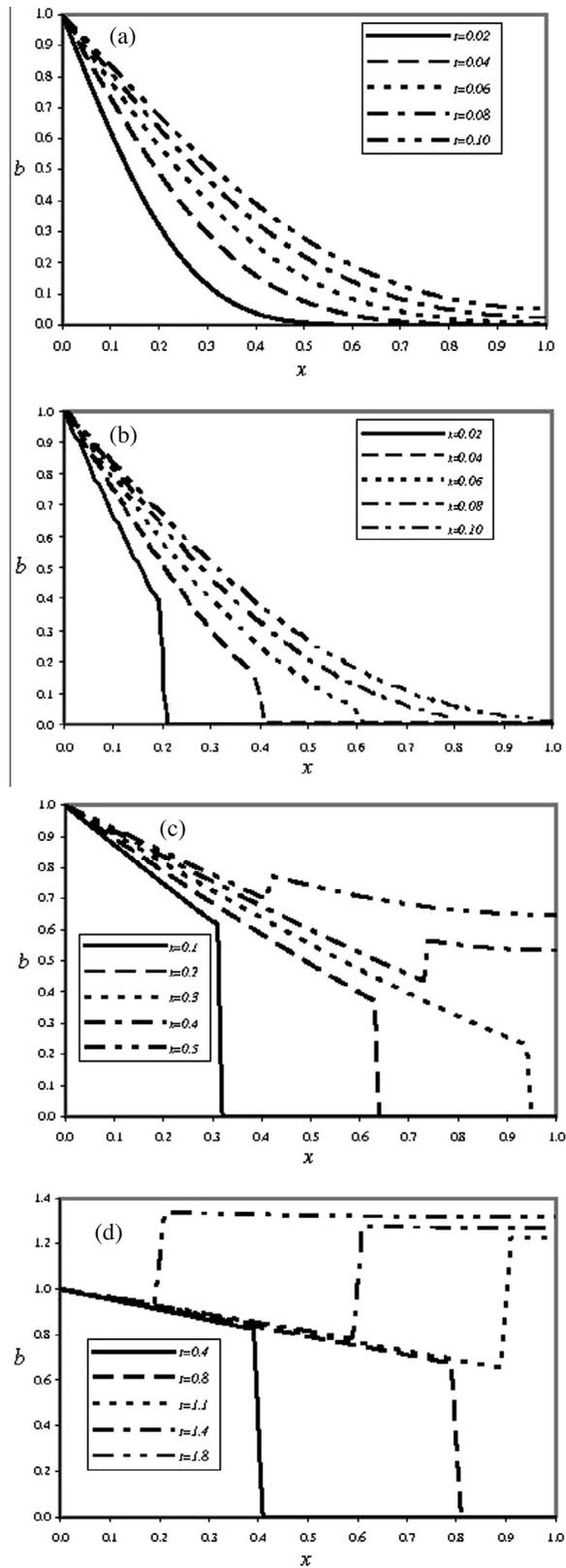


Fig. 1. Dimensionless bacterial concentration profiles for $a \gg p$ (Experiment 1) and different values of parameter q . (a) $q = 0.001$. (b) $q = 0.01$. (c) $q = 0.1$. (d) $q = 1$.

$$J_b + q \frac{\partial J_b}{\partial t} = -\frac{\partial b}{\partial x} + \frac{r}{(s+a)^2} \frac{\partial a}{\partial x} b, \quad (14)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + v \frac{\partial J_a}{\partial x} = -w \frac{a}{(p+a)} b, \quad (15)$$

$$J_a = -\frac{\partial a}{\partial x}. \quad (16)$$

The above equations were solved by expanding (13) and (14) (Lax–Wendroff scheme [23]):

$$b(x, t + \Delta t) = b(x, t) + \Delta t \frac{\partial b(x, t)}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 b(x, t)}{\partial t^2}, \quad (17)$$

$$J_b(x, t + \Delta t) = J_b(x, t) + \Delta t \frac{\partial J_b(x, t)}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 J_b(x, t)}{\partial t^2}, \quad (18)$$

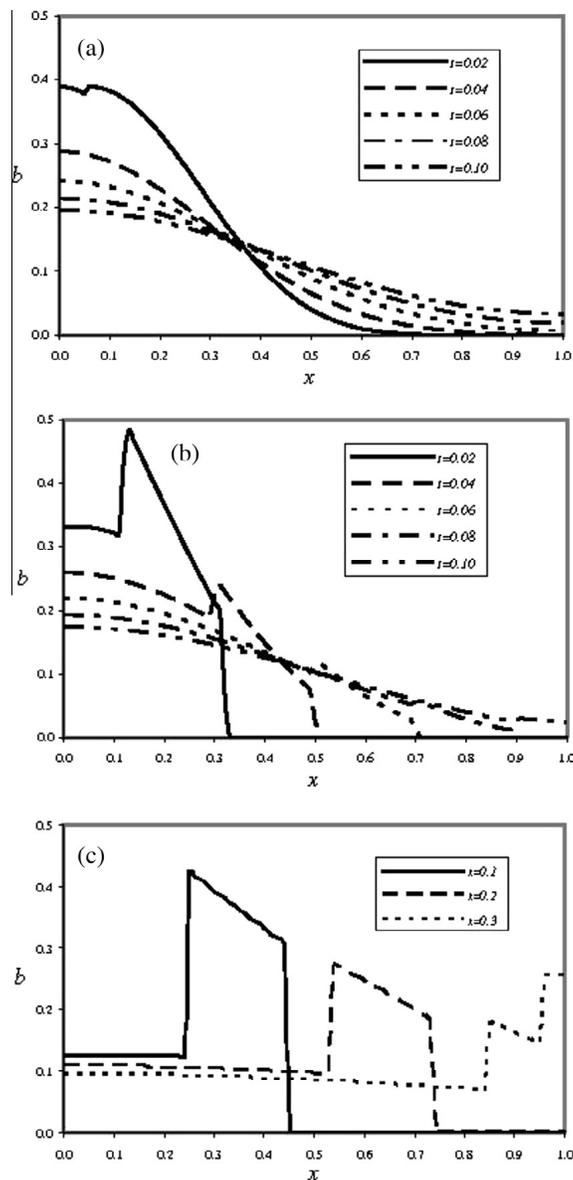


Fig. 2. Dimensionless bacterial profiles for $a \gg p$ (Experiment 2). $b_0(x) = 1 - H(x - 0.1)$, and different values of parameter q . (a) $q = 0.001$. (b) $q = 0.01$. (c) $q = 0.1$.

where Δt is the time increment. Then, Eqs. (15) and (16) are integrated by using the trapezoid rule (Crank–Nicholson method [23]):

$$a_x^{t+\Delta t} - a_x^t = \frac{\Delta t}{2} \left(v \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - w \frac{a}{(p+a)} b \right) \Big|_x^{t+\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} \left(v \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - w \frac{a}{(p+a)} b \right) \Big|_x^t. \quad (19)$$

The dimensionless system was solved for different values of L and A_0 to investigate the effect of length scale and nutrient availability on transient bacterial and nutrient concentration profiles through sand columns. Furthermore, two limiting cases of Monod function were studied. The first one corresponds to a nutrient saturated column, that is, $a \gg p$ and we assume that a consumption is negligible; therefore, no chemotactic effect is considered. The second limiting case takes into account the opposite one, $a \ll p$, and Monod function can be approximated by $a/(p+a) \approx a/p$; in this case the effect of chemotaxis is present as a is being consumed and the gradient is established. Later on, it will be shown that bacterial diffusion process is faster than growth and it is necessary to assume an initial non-uniform nutrient concentration distribution in order to evaluate the chemotactic effect.

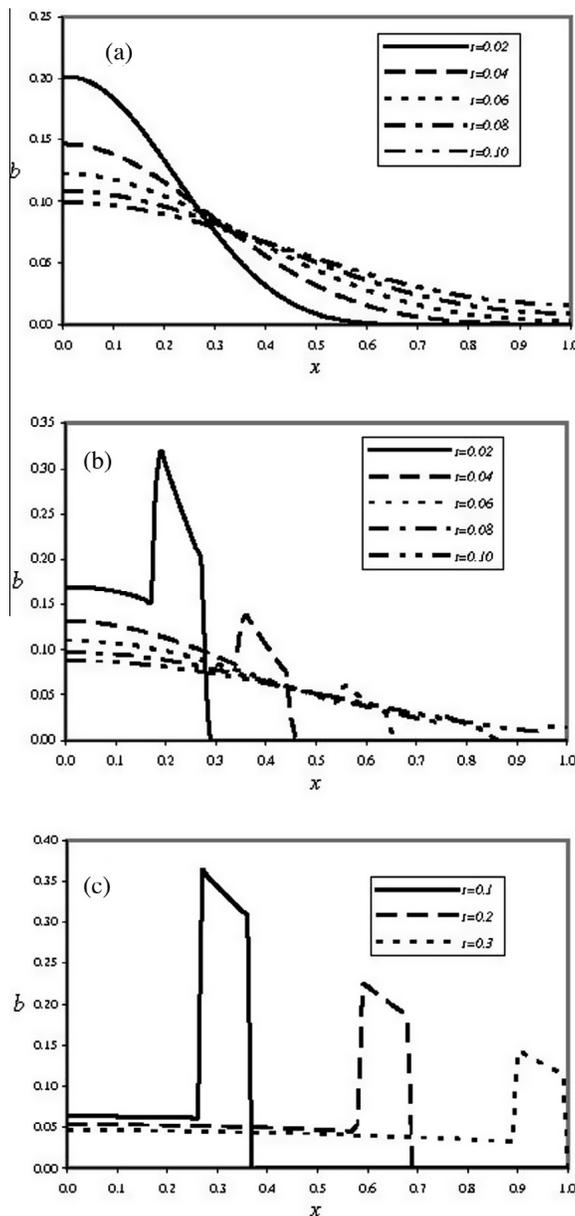


Fig. 3. Dimensionless bacterial profiles for $a \gg p$ (Experiment 2), $b_0(x) = 1 - H(x - 0.005)$, and different values of parameter q . (a) $q = 0.001$. (b) $q = 0.01$. (c) $q = 0.1$.

3. Results and discussion

3.1. Limiting case $a \gg p$

In this limiting case it is assumed that nutrient availability is unlimited and the consumption is insignificant; as a result, the nutrient concentration gradient created during the process and the consequent chemotactic effect, are negligible. The Monod function is approximated as $a/(p+a) \approx 1$; this could be a good estimation for $a \geq 100p$, or $A \geq 3$ mM, according to Eqs. (11) and (12) and Table 1. For instance, the initial nutrient concentration used in Sharma et al. experiments was 25 mM. In Fig. 1 dimensionless transient bacterial concentration profiles are shown for Experiment 1 (Eqs. (7) and (8)), $q = 0.001$ ($L = 0.324$ cm) and different dimensionless time values ($t = 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10$). Bacterial concentration increases monotonically and there is no qualitative differences with respect to classical Keller–Segel model. Typical column lengths used in bacterial migration experiments are 8–10 cm. When q parameter increases to 0.01 is possible to observe well defined wave fronts which point out the finite speed of signal propagation model feature, the corresponding column length is $L = 0.102$ cm and the monotonic increase of bacterial concentration is kept. The sharp fronts of concentration can also arise from nonlinear diffusion processes in which diffusivity is an increasing function of concentration [24]. Moreover, mass transfer with diffusivity having a discontinuity at definite concentration, leads to an advancing front [25]. For $q = 0.1$ mass wave is reflected on boundary at $x = 1$ and some regions can be found where $b(x_1, t) > b(x_2, t)$ for $x_1 > x_2$, what is physically unexpected. However, for $q = 1$ MC equation fails and predicts a higher bacterial concentration inside column than the original perturbation. Taitel has mentioned this physical paradox earlier in the study of hyperbolic heat conduction in rigid solids [26], and Barletta and Zanchini related this feature with the negative entropy production under the hypothesis of local equilibrium [27]. According to above results, there is a q parameter interval where the MC model leads to physically valid predictions and qualitatively different from those derived by Keller–Segel model; for lower q values than 0.01, the bacterial concentration profiles are classic diffusion-type and for values higher than 0.1, MC model could lead to nonphysical predictions. The corresponding length and time scales are 0.03–0.10 cm and 10–100 s, respectively, in that time scale bacterial growth is insignificant and the overall process is controlled by random motility.

Fig. 2 depicts results when initial and boundary conditions are changed for Experiment 2, the column is inoculated at $x = 0$ with a finite volume of bacterial culture with b_0 concentration. The initial condition is approximated by $b_0(x) = 1 - H(x - 0.1)$, where H is the Heaviside step function and represents that 10% of length column is filled with bacterial solution. For $q = 0.001$ profiles are almost Fickian, except for $t = 0.02$ and x near to 0, where a small wave front can be

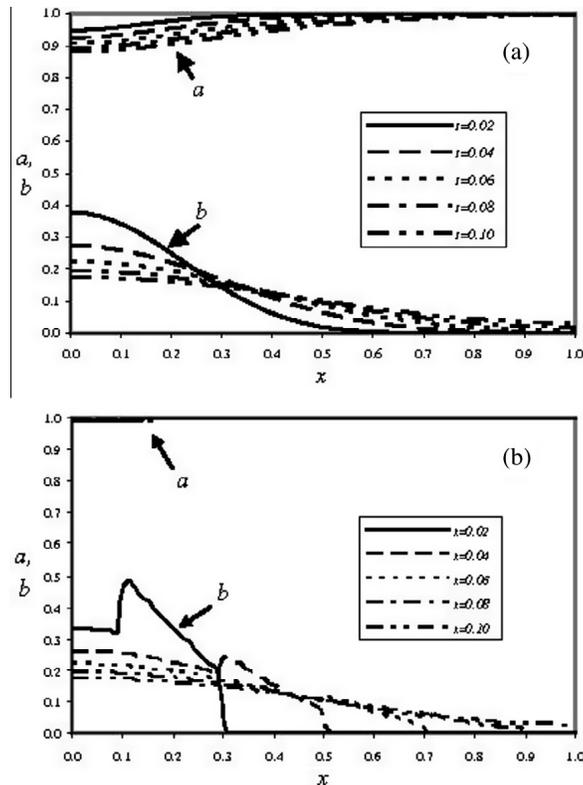


Fig. 4. Dimensionless bacterial and nutrient concentration profiles for $a \ll p$ (Experiment 2), $b_0(x) = 1 - H(x - 0.10)$, $a_0(x) = 1$, and different values of parameter q . (a) $q = 0.001$. (b) $q = 0.01$.

observed; for $q = 0.01$ the initial pulse moves through column with two concentration jumps until it spreads out at $t = 0.10$. A more defined moving pulse is shown for $q = 0.1$ but it does not vanish at $x = 1$ and reflects on this boundary.

Fig. 3 illustrates dimensionless profiles when 5% of column length is inoculated. For $q = 0.1$, solution appears as a traveling wave which reflects on system boundaries. This indicates that initial and boundary conditions could affect physical predictions of MC equation and one must carefully examine the results in addition to q parameter. Under the condition of a nutrient saturated environment, the principal mechanisms of bacterial transport are random motility and bacterial growth; moreover, the effect of relaxation time in transient bacterial profiles is significant at short times when bacterial growth is negligible.

3.2. Limiting case $a \ll p$

In this case Monod function is approximated by $a/(p + a) \approx a/p$ and represents a low nutrient availability. This growth condition could be more indicative of a natural environment where nutrient is limited. Furthermore, nutrient consumption is considered and the consequent chemotactic effect. In Fig. 4, the generation of a nutrient gradient is only significant for

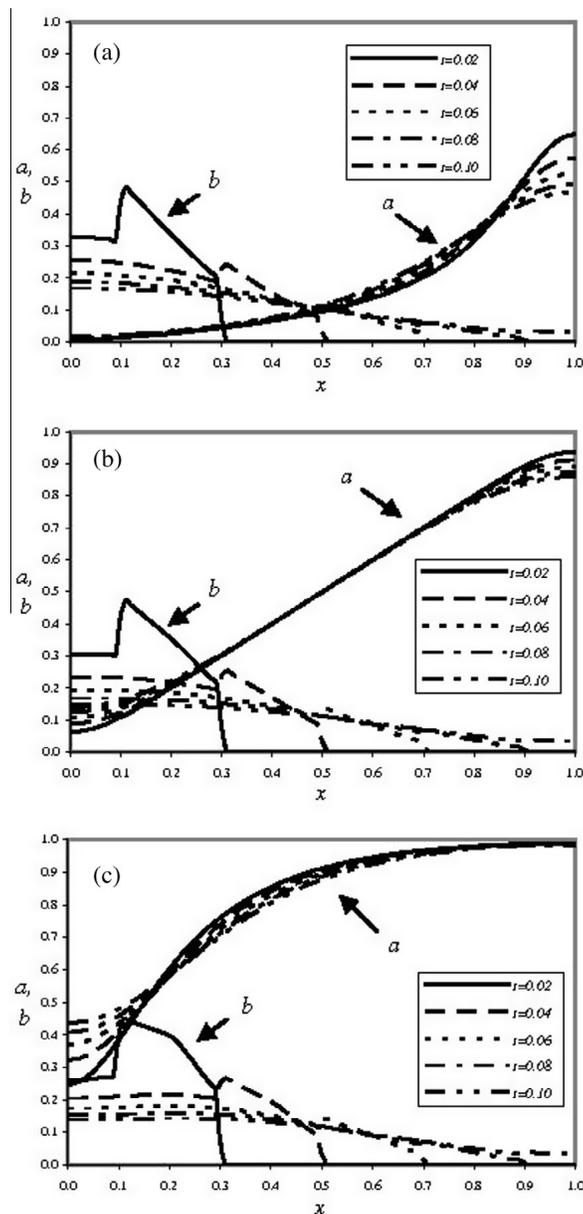


Fig. 5. Dimensionless bacterial and nutrient concentration profiles for $a \ll p$ (Experiment 2), $b_0(x) = 1 - H(x - 0.10)$, $q = 0.01$, and different initial nutrient concentration profiles (a) $a_0(x) = x/(10 - 9x)$. (b) $a_0(x) = x$. (c) $a_0(x) = 1 - \exp(-5x)$.

$q = 0.001$ and is almost inappreciable for $q = 0.01$. These results validate the assumption of limiting case $a \gg p$ which neglects galactose consumption for instance, and indicate that relaxation effect is important in time scales when bacterial growth is of little account. This is a direct consequence of the values of k_m and τ parameters, $9.7 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ and 10 s , respectively. A measurable bacterial growth in porous medium could take as much as 6 h whereas bacterial population diffuses through column with finite dimensionless velocity $q^{-1/2}$ and the corresponding diffusion time $\tau q^{-1/2}$ (time when wave front reaches boundary $X = L$), for $q = 1$ is 10 s and for $q = 0.001$ is 316 s , approximately.

According to above results, we assume an initial non-uniform nutrient distribution in order to evaluate the chemotactic effect. The first initial nutrient distribution is represented by a concave up function, the second is a straight line and the last is a concave down function; these initial nutrient distributions are in ascending order with respect to galactose gradient. Fig. 5 shows the resulting transient bacterial concentration profiles which keep the same general behavior while the main difference can be observed for $t = 0.02$. Fig. 6 compares bacterial profiles for $t = 0.02$ and one can note how bacterial concentration decreases as nutrient gradient increases before the first jump concentration (at $x = 0.1$), between the first and the second jump concentration (between $x = 0.1$ and $x = 0.3$) the outcome is inverted and the wave front is the same for all of them.

3.3. Two-dimensional system

Several natural and synthetic media where microorganisms can proliferate have anisotropic properties, which could affect their movement through them. To characterize this feature we introduce a random motility tensor coefficient, which is given by:

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_x & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y & 0 \\ 0 & 0 & \mu_z \end{pmatrix}, \tag{20}$$

where μ_x , μ_y and μ_z are the principal diffusivities in X-, Y- and Z-direction, respectively. In this section we analyze how bacterial population migrate into a square orthotropic porous medium of length L . The process takes place in the X–Y plane and we neglect growth and chemotactic effect due to one-dimensional preliminary results. The initial and boundary conditions are defined by:

$$B(X, Y, 0) = B_0(X, Y); \quad \frac{\partial B}{\partial T}(X, Y, 0) = 0, \tag{21}$$

$$B(0, Y, T > 0) = B(1, Y, T > 0) = B(X, 0, T > 0) = B(X, 1, T > 0) = 0, \tag{22}$$

where $B_0(X, Y)$ is an initial bacterial concentration distribution.

The solution of Eqs. (1), (3), (20)–(22) with $R_B = 0$ can be obtained by the method of separation of variables and is expressed in dimensionless form as:

$$b(x, y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{nm} \theta_{nm}(t) \sin(n\pi x) \sin(m\pi y),$$

$$C_{nm} = \frac{4 \int_0^1 \int_0^1 \sin(n\pi x) \sin(m\pi y) b_0(x, y) dx dy}{\theta_{nm}(0)},$$

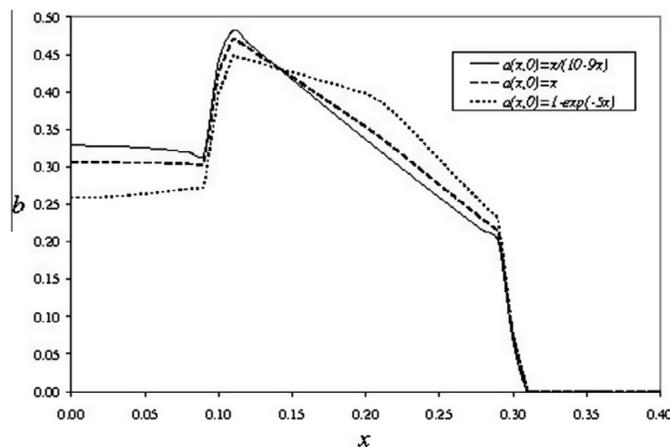


Fig. 6. Dimensionless bacterial concentration profiles for $a \ll p$ (Experiment 2), $b_0(x) = 1 - H(x - 0.10)$, $q = 0.01$, $t = 0.02$, and different initial nutrient concentration profiles.

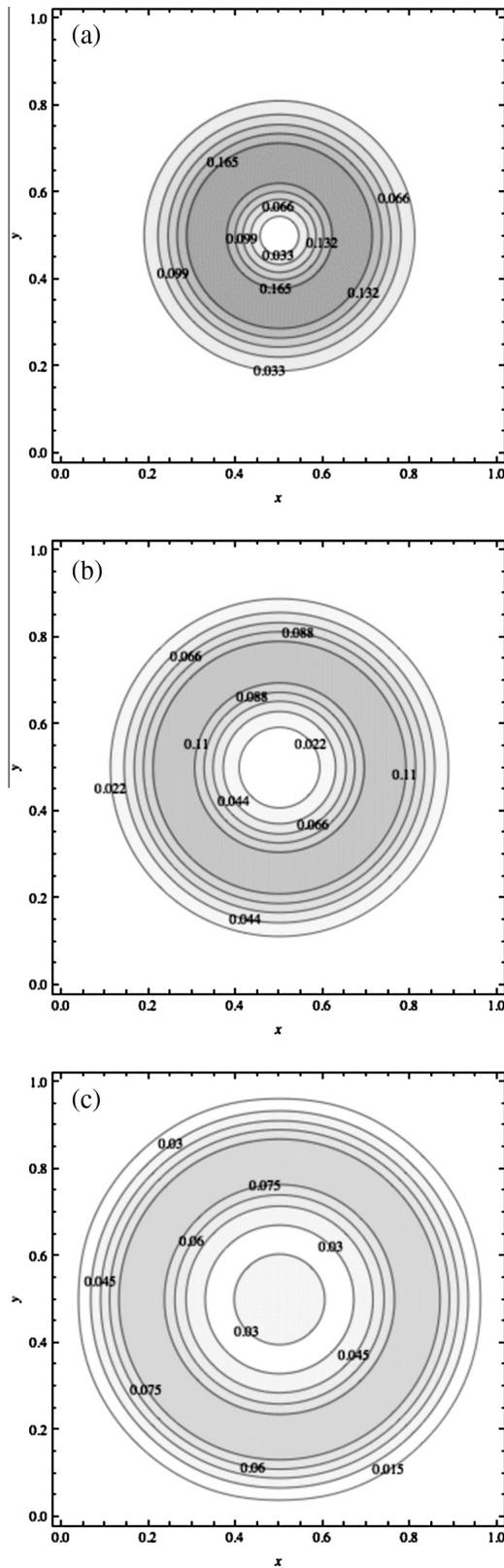


Fig. 7. Dimensionless bacterial concentration profiles for two-dimensional system (Eq. (23)), $q = 0.017$, $h = 1$ (isotropic medium), and different time values. (a) $t = 0.02$. (b) $t = 0.03$. (c) $t = 0.04$.

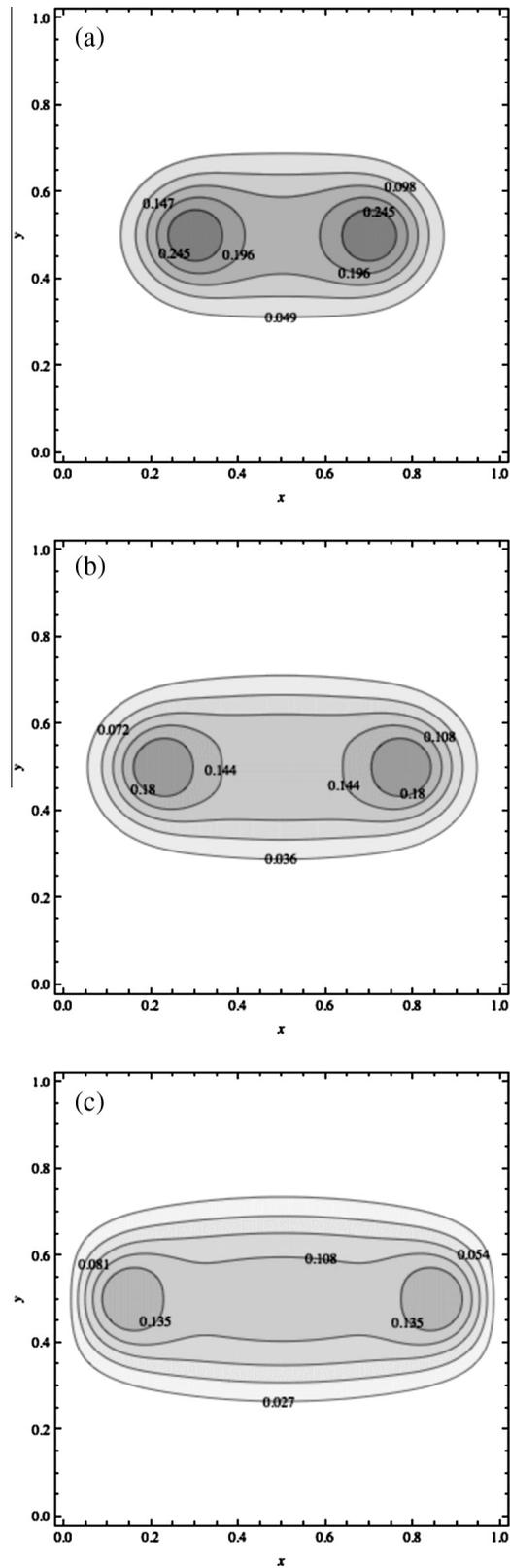


Fig. 8. Dimensionless bacterial concentration profiles for two-dimensional system (Eq. (23)), $q = 0.017$, $h = 0.1$, and different time values. (a) $t = 0.03$. (b) $t = 0.04$. (c) $t = 0.05$.

$$\theta_{nm} = \begin{cases} \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(\exp\left(\frac{\sqrt{rad_{nm}t}}{2q}\right) + \left(\frac{\sqrt{rad_{nm}-1}}{\sqrt{rad_{nm}+1}}\right) \exp\left(\frac{-\sqrt{rad_{nm}t}}{2q}\right) \right) & \text{if } rad_{nm} > 0 \\ \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(\cos\left(\frac{\sqrt{-rad_{nm}t}}{2q}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{-rad_{nm}}}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{-rad_{nm}t}}{2q}\right) \right) & \text{if } rad_{nm} < 0 \\ \exp\left(\frac{-t}{2q}\right) \left(1 + \frac{t}{2q}\right) & \text{if } rad_{nm} = 0 \end{cases} \quad (23)$$

$$rad_{nm} = 1 - 4q\pi^2(n^2 + hm^2).$$

Dimensionless variable y is defined by Y/L and h parameter is the ratio μ_y/μ_x . In Fig. 7, dimensionless bacterial concentration profiles are shown for $q = 0.017$, $h = 1$ (isotropic medium), $b_0(x,y) = \exp(-80((x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2))$ and different dimensionless time values ($t = 0.02, 0.03$ and 0.04); a concentric wave front that moves towards the boundaries of the system is observed. This pattern is very similar to experimental observations by Budrene and Berg [28,29]; they performed bacterial migration experiments in Petri dishes containing semi-solid agar medium and reported the formation of a single compact traveling band (swarm ring) that moves slowly outwards, at low substrate concentrations. Furthermore, Ben-Jacob observed a complex pattern of concentric rings for colonies of *Bacillus subtilis* at high agar (hard medium) and nutrient concentrations [30]. Fig. 8 depicts bacterial concentration for $q = 0.017$ and $h = 0.1$; as a result, the mass wave in x -direction moves faster than does in y -direction. The anisotropy of the medium leads to a preferential mass flow that produces regions with higher bacterial concentration, which are observed along the x direction, and low concentration regions for $y \rightarrow 0$ and $y \rightarrow 1$.

4. Conclusions

A hyperbolic model for the diffusion and growth of a bacterial population in an anisotropic porous medium has been presented. MC equation was used to model bacterial diffusion and two limiting cases of Monod function were assumed to include bacterial growth. We used data from *E. coli* RW262 and galactose migration experiments in porous medium. In the first limiting case, unlimited nutrient availability ($a \gg p$), it was shown that relaxation effect is significant for length scale equal and lower than 0.1 cm ($q = 0.01$) and process time of 100 s and also was pointed out that MC equation fails and predicts nonphysical bacterial concentration profiles for $L = 0.01$ cm ($q = 1.0$). Under those circumstances, bacterial growth is negligible and chemotactic effect can influence diffusion only if an initial nutrient gradient already exists. When nutrient is limited, second limiting case ($a \ll p$), consumption is also insignificant. Later, we presented an analytical solution for the two-dimensional diffusion of bacterial population within a square orthotropic medium and showed that material anisotropy leads to preferential mass flows, this solution could be useful to validate numerical schemes applied to KS–MC systems. Thus, practical usefulness of MC model is limited to above mentioned length and time scales in the case of the analyzed system; for example, it could be used to model contamination of wet rough surfaces during the first minutes after inoculation and other systems with length scale between 0.1 ($q = 0.01$) and 0.03 ($q = 0.1$) cm, approximately.

Acknowledgment

Financial support from Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT, Mexico) (PhD Scholarship to R.M.H.) is gratefully acknowledged.

References

- [1] E.F. Keller, L.A. Segel, Initiation of slime mold aggregation viewed as an instability, *J. Theor. Biol.* 26 (1970) 399–415.
- [2] T. Hillen, Hyperbolic models for chemosensitive movement, *Math. Models Methods Appl. Sci.* 12 (2002) 1–28.
- [3] Y. Dolak, T. Hillen, Cattaneo models for chemosensitive movement. Numerical solution and pattern formation, *J. Math. Biol.* 46 (2003) 153–170.
- [4] F. Filbet, P. Laurencot, B. Perthame, Derivation of hyperbolic models for chemosensitive movement, *J. Math. Biol.* 50 (2005) 189–207.
- [5] I.I. Abarzhi, Wave mechanism of mass transfer for kinetics of adsorption in biporous media, *Colloids Surf. A* 164 (2000) 105–113.
- [6] M.M. Tung, M. Trujillo, J.A. López Molina, M.J. Rivera, E.J. Berjano, Modeling the heating of biological tissue based on the hyperbolic heat transfer equation, *Math. Comput. Model.* 50 (2009) 665–672.
- [7] H. Wang, W. Ma, X. Zhang, W. Wang, Z. Guo, Theoretical and experimental study on the heat transport in metallic nanofilms heated by ultra-short pulsed laser, *Int. J. Heat Mass Transfer* 54 (2011) 967–974.
- [8] M.N. Özisik, D.Y. Tzou, On the wave theory in heat conduction, *ASME J. Heat Transfer* 116 (1994) 526–535.
- [9] W. Kaminski, Hyperbolic heat conduction equation for materials with a nonhomogeneous inner structure, *ASME J. Heat Transfer* 112 (1990) 555–560.
- [10] K. Mitra, S. Kumar, A. Vedavarz, M.K. Moallemi, Experimental evidence of hyperbolic heat conduction in processed meat, *ASME J. Heat Transfer* 117 (1995) 568–573.
- [11] A. Banerjee, A.A. Ogale, C. Das, K. Mitra, C. Subramanian, Temperature distribution in different materials due to short pulse laser irradiation, *Heat Transfer Eng.* 26 (2005) 41–49.
- [12] H. Herwig, K. Beckert, Fourier versus non-Fourier heat conduction in materials with a non-homogeneous inner structure, *ASME J. Heat Transfer* 122 (2000) 363–365.
- [13] T.J. Bright, Z.M. Zhang, Common misperceptions of the hyperbolic heat equation, *J. Thermophys. Heat Transfer* 23 (2009) 601–607.
- [14] E.P. Scott, M. Tilahun, B. Vick, The question of thermal waves in heterogeneous and biological materials, *ASME J. Biomech. Eng.* 131 (2009) 074518–1–6.
- [15] B. Hong, P. Su, C. Chou, C. Hung, Realization of non-Fourier phenomenon in heat transfer with 2D transfer function, *Appl. Math. Model.* 35 (2011) 4031–4043.
- [16] P. Guillemet, J.P. Bardon, C. Rauch, Experimental route to heat conduction beyond the Fourier equation, *Int. J. Heat Mass Transfer* 40 (1997) 4043–4053.
- [17] J. Ordóñez-Miranda, J.J. Alvarado-Gil, Thermal wave oscillations and thermal relaxation time determination in a hyperbolic heat transport model, *Int. J. Therm. Sci.* 48 (2009) 2053–2062.

- [18] P.J. Reynolds, P. Sharma, G.E. Jenneman, M.J. McInerney, Mechanisms of microbial movement in subsurface materials, *Appl. Environ. Microbiol.* 55 (1989) 2280–2286.
- [19] P.K. Sharma, M.J. McInerney, M.R. Knapp, In situ growth and activity and models of penetration of *Escherichia coli* in unconsolidated porous materials, *Appl. Environ. Microbiol.* 59 (1993) 3686–3694.
- [20] J.W. Barton, R.M. Ford, Mathematical model for characterization of bacterial migration through sand cores, *Biotechnol. Bioeng.* 53 (1997) 487–496.
- [21] J.E. Bailey, D.F. Ollis, *Biochemical Engineering Fundamentals*, second ed., McGraw-Hill, New York, 1986.
- [22] C.W. Macosko, *Rheology: Principles, Measurements, and Applications*, Wiley-VCH, USA, 1994.
- [23] R.J. LeVeque, *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*, SIAM, USA, 2007.
- [24] J.R. Philip, Theory of infiltration, *Adv. Hydrosci.* 5 (1969) 215–296.
- [25] J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*, second ed., Clarendon Press, Oxford, GB, 1975.
- [26] Y. Taitel, On the parabolic, hyperbolic and discrete formulation of the heat conduction equation, *Int. J. Heat Mass Transfer* 15 (1972) 369–371.
- [27] A. Barletta, E. Zanchini, Hyperbolic heat conduction and local equilibrium: a second law analysis, *Int. J. Heat Mass Transfer* 40 (1997) 1007–1011.
- [28] E.O. Budrene, H.C. Berg, Complex patterns formed by motile cells of *Escherichia coli*, *Nature* 349 (1991) 630–633.
- [29] E.O. Budrene, H.C. Berg, Dynamics of formation of symmetrical patterns by chemotactic bacteria, *Nature* 376 (1995) 49–53.
- [30] E. Ben-Jacob, From snowflake formation to growth of bacterial colonies II: cooperative formation of complex colonial patterns, *Contemp. Phys.* 38 (1997) 205–241.