



Universitat
de les Illes Balears

TREBALL DE FI DE GRAU

SIMULACIÓ DE FLOTABILITAT DINÀMICA A ESCALA CEL·LULAR, ASPECTES MECÀNICS

Neus Mateu Mercader

Grau de: Física

Facultat de: Ciències

Any acadèmic 2019-20

SIMULACIÓ DE FLOTABILITAT DINÀMICA A ESCALA CEL·LULAR, ASPECTES MECÀNICS

Neus Mateu Mercader

Treball de Fi de Grau

Facultat de: Ciències

Universitat de les Illes Balears

Any acadèmic 2019-20

Paraules clau del treball:

Interacció Fluid-Estructura, Immersed Boundary methods, Diatomees

Nom del tutor / la tutora del treball: Carles Bona-Casas

Autoritz la Universitat a incloure aquest treball en el repositori institucional per consultar-lo en accés obert i difondre'l en línia, amb finalitats exclusivament acadèmiques i d'investigació

Autor/a		Tutor/a	
Sí	No	Sí	No
<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Resum

En aquest treball estudiarem els problemes d'interacció fluid-estructura, així com els seus mètodes de resolució computacional per tal de poder simular els efectes que té un sòlid que està immers en un fluid. Concretament utilitzarem el *Immersed boundary method* per simular la flotabilitat dinàmica d'un dels microorganismes clau per l'ecosistema de la Terra, la diatomea.

Índex

1	Introducció	4
1.1	Sistema mecànic del problema FSI	4
1.2	Resolució computacional al problema FSI	5
2	Immersed Boundary Methods	7
2.1	Continuous forcing approach	8
3	Diatomees	9
3.1	Models mecànics	11
4	Simulació i Resultats	12
4.1	Vesícula vs Càpsula	12
4.2	Flotabilitat dinàmica	15
5	Conclusió	19

1 Introducció

La interacció Fluid-Estructura (FSI) ha estat sempre un tema de molt interès en diferents àmbits de la ciència tals com l'enginyeria, la biomecànica i la física. Podem descriure aquesta interacció com una deformació en l'estructura d'un sòlid deguda a la viscositat/no-viscositat d'un fluid, produint així no només un canvi estructural del cos sinó també un canvi en la geometria del domini i un canvi en el comportament del fluid. Els problemes FSI són molt complexos per resoldre analíticament, per això s'han desenvolupat múltiples mètodes de resolució computacional. Però abans, anem a descriure el nostre sistema físic.

1.1 Sistema mecànic del problema FSI

Com el nom indica, aquest sistema estarà format per un fluid, un sòlid i una interfície (també anomenada *superfície humida*) que separa ambdós dominis.

En primer lloc, considerem un fluid viscos Newtonià en un règim incompressible on el seu moviment ve dictat per les equacions de Navier-Stokes.

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) + \nabla p - \mu \Delta \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{a} \quad \Omega_f \quad (2)$$

on $\mathbf{v}(\mathbf{x},t)$ és la velocitat del fluid, $p(\mathbf{x},t)$ és la pressió, Ω_f el domini del fluid, ρ la densitat i μ la viscositat.

Generalment, aquest fluid està descrit des de el punt de vista Eulerià on l'observador es troba situat espacialment en una posició fixa observant una determinada regió de l'espai al llarg del temps, t , independentment de per on es desplacin les partícules.

En segon lloc, definim un sòlid en un domini denotat com Ω_s . Suposem que es tracta d'un cos homogeni, és a dir, que les propietats són les mateixes a lo llarg del seu domini. A més, assumirem que és isotròpic per lo que les seves propietats mecàniques són les mateixes en totes les direccions. En aquest cas, es sol utilitzar la perspectiva Lagrangiana on l'observador es mou juntament amb una partícula determinada a lo llarg del temps i l'espai. Si denotam $\mathbf{u}(\mathbf{q},t)$ com el desplaçament lagrangia, el sòlid s'ha de moure d'acord a la velocitat local del fluid. Per lo que,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}(\mathbf{q}, t) = \mathbf{v} \quad \text{a} \quad \Omega_s \quad (3)$$

on \mathbf{q} és el conjunt de coordenades lagrangianes.

I finalment, la interfície comú entre els dos dominis. Per tal que ambdós dominis s'acoblin correctament, aquests no es poden solapar ja que no pot haver espai ocupat

per partícules del sòlid i del fluid al mateix temps, ni es poden estar separar lo que voldria dir que hi ha un espai “buit” i això no tendria un sentit físic. Per aquest motiu sovint pel domini del fluid es sol utilitzar el mètode ALE (*Arbitrary Lagrangean-Elerian*) [1], en contraposició de la descripció purament Euleriana, que com el nom indica és una combinació de les perspectives Euleriana i Lagrangiana, de manera que ara l’observador es pot moure seguint (o no) el moviment d’una partícula. Així doncs, si volguéssim definir una malla computacional pel domini del fluid amb aquest tipus de descripció, aquesta consistiria amb una malla on per una banda uns nodes podrien seguir les partícules del fluid que es troben a la vora de la interfície, mentre la resta es podria moure casi lliurement sempre i quant no deformin massa la malla per no perdre molta precisió computacional [1]. Per altre banda, i hem d’afegir la condició de que en la interfície la velocitat del fluid ha de ser igual a la membrana, és a dir, el fluid té velocitat zero respecte a aquesta:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad \text{a} \quad \Gamma_{fs} \quad (4)$$

on denotam Γ_{FS} a la superfície humida que separa ambdós dominis.

A més, hem d’imposar un equilibri de forces a la superfície humida creades per les tensions en la interfície:

$$\sigma_f \cdot \mathbf{n}_f = -\sigma_s \cdot \mathbf{n}_s \quad \text{a} \quad \Gamma_{fs} \quad (5)$$

on σ és la tensió i \mathbf{n} és el vector normal per a cada un dels dominis.

A tot això s’ha de tenir en compte que donat que es tracta d’un problema d’equacions diferencials s’han de imposar les condicions inicials apropiades, tant pel fluid com pel sòlid en qüestió.

1.2 Resolució computacional al problema FSI

Computacionalment la resolució de problemes tipus FSI es divideixen principalment en dues categories: *Monolithic approach* i *Partitioned approach*. Aquesta primera aproximació consisteix en resoldre simultàniament ambdós dominis, el del fluid i el del sòlid juntament amb l’acoblament, en un sol sistema d’equacions. En canvi, per el *Partitioned approach* la resolució es divideix en dos problemes, un per cada domini amb un tercer mòdul que permet acoblar els dos sistemes. Per altre banda, segons el tractament que es faci de la malla també es pot classificar en dos grups: *Conforming mesh* i *Non-conforming mesh*. El mètode *Conforming mesh* consisteix en la resolució en tres subtasques de manera que es conforma la interfície aplicant les condicions de contorn pels respectius dominis. En cas de deformació del sòlid, ambdues malles s’han de moure per tal de que la interfície segueixi complint totes les condicions. En canvi, per *Non-conforming mesh* les condicions de contorn són aplicades directament en el sistema d’equacions per el domini del fluid i del sòlid de manera que la geometria

de cada una de les malles és independent una de l'altre (veure Figura 1). Aquesta darrera aproximació, és molt usada en una sèrie de mètodes anomenats *Immersed Boundary methods (IB-methods)* aplicats molt sovint a la resolució de problemes FSI i on entrarem amb més detall a la secció 2.

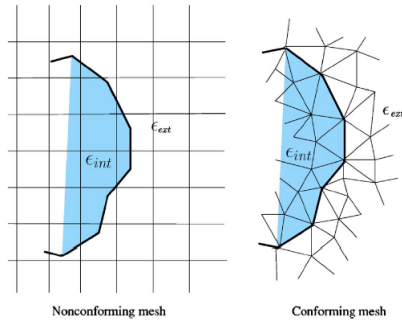


Figura 1: Exemple de *Conforming mesh/Non-Conforming mesh* en un espai 2D [2].

Tots aquests tipus de simulacions ens permeten estudiar multituds de sistemes en diferents àmbits de investigació tals com la medicina (funcionament del cor, esòfag...) o la biologia. En aquest treball, ens centrarem amb l'aplicació dels mètodes IB per un sistema biològic fonamental per la ecologia de la Terra anomenat diatomees, i que a més tenen la gran peculiaritat de que són organismes capaços de generar moviment de forma activa, sense disposar de estructures mòbils, realitzant canvis de densitat davant estímuls mecànics externs. Aleshores, donat que és un sistema molt complex on no es disposa de un model mecànic fidedigne, anem a valorar fins a quin punt és important el model que hi apliquem i quines diferències hi ha en els resultats.

2 Immersed Boundary Methods

A l'any 1972, Charles Peskin va idear una metodologia anomenada *Immersed Boundary method (IB-method)*, que ens permet observar les interaccions que es produeixen quan hi ha un cos submergit dins un fluid mitjançant simulacions computacionals.

El mètode consisteix en la discretització de les equacions de Navier-Stokes [3] i en imposar de forma indirecta les condicions de contorn mitjançant una funció de forçament, \mathbf{f} , introduint les modificacions necessàries per tal de que es compleixin les principals propietats de conservació d'energia, moment i massa. Aquesta funció de forçament es calcula per separat a partir del model estructural, representant d'aquesta manera els efectes de la immersió d'un cos en el domini del fluid. Així doncs, és com si el sòlid formàs part del domini del fluid i incorporéssim l'impacte d'aquest cos que té al flux modificant les equacions dictades per el fluid [3]. D'aquesta manera, aquest mètode ens permet que la forma del sòlid en qüestió no necessàriament ha d'encaixar amb la discretització del domini (*Non-conforming mesh*).

Les equacions que regeixen el sistema són les següents (veure secció 1.2):

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}\right) + \nabla p - \mu \Delta \mathbf{v} = \mathbf{f} \quad (6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{a} \quad \Omega_f \quad (7)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad \text{a} \quad \Gamma_{fs} \quad (8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}(\mathbf{q}, t) = \mathbf{v} \quad \text{a} \quad \Omega_s \quad (9)$$

$$\sigma_f \cdot \mathbf{n}_f = -\sigma_s \cdot \mathbf{n}_s \quad \text{a} \quad \Gamma_{fs} \quad (10)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 \quad (11)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \quad (12)$$

Els mètodes IB es classifiquen segons com s'implementa \mathbf{f} , dividint així els mètodes en dos grups principals: el *Continuous forcing methods* i el *Discret forcing methods*. En la primera aproximació, una vegada calculada \mathbf{f} es discretitzen les equacions (6) i (7) per posteriorment resoldre el sistema per a tot el domini, $\Omega_f + \Omega_s$. Aquesta funció, es calcula per diversos mètodes i per segons quin tipus de contorn té el sistema (rígid o elàstic). En canvi, pel *Discret forcing methods* el forçament s'aplica una vegada s'han discretitzat les equacions de Navier-Stokes, és a dir, sense el terme \mathbf{f} en l'equació (6). Una vegada discretitzades, les cel·les pròximes a la interfície són ajustades amb \mathbf{f} calculada per diferents mètodes com el *Direct forcing* basat en la interpolació i el *Gosh-cell finite-difference approach* per tal d'introduir els efectes del “contorn submergit” [4].

En aquest treball entrarem en més profunditat en el *Continuous forcing method* i concretament al cas de *Elastic boundaries*.

2.1 Continuous forcing approach

Un dels avantatges d'aquesta aproximació és que és independent a la discretització espacial, com sí ho és el *Discret forcing methods*. Existeixen diversos mètodes que utilitzen aquesta aproximació per a diversos casos: *Elastic boundaries*, *Rigid boundaries* i *Distributed Lagrange multiplier method*. Com hem esmentat anteriorment en aquest treball ens és d'interès el cas de *Elastic boundaries*.

El mètode original ideat per Peskin es troba dins aquesta categoria, metodologia que va idear per l'estudi del flux de la sang a través de les vàlvules del cor. Es tractava d'un mètode mixta Eulerià-Lagrangià de diferències finites on el fluid interacciona amb un contorn immers flexible en l'espai de Cartesianes. Aquest contorn era definit com un conjunt de fibres elàstiques sense massa que es mouen d'acord a la velocitat local del fluid descrites des del punt de vista Lagrangià, que ve descrit per l'equació:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t}(\mathbf{q}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{X}(\mathbf{q}, t)) \quad (13)$$

on $\mathbf{X}(\mathbf{q}, t)$ és la corba que representa la fibra, és a dir, la configuració del contorn, i \mathbf{q} és el conjunt de coordenades lagrangianes.

Peskin va definir la força de forçament, \mathbf{f} , com la força que exerceix cada una d'aquestes fibres a lo llarg del tot el contorn a les proximitats del fluid i que ve donada per l'expressió:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Gamma_{fs}} \mathbf{F}(\mathbf{q}, t) \delta(x - \mathbf{X}(\mathbf{q}, t)) d\mathbf{q} \quad (14)$$

on δ és la funció de delta de Dirac i $\mathbf{F}(\mathbf{q}, t)$ és la força del contorn en un determinat segment per a un temps t .

Anàlogament, aquestes fibres es poden representar per un objecte elàstic, $\mathbf{S}=\mathbf{S}(t)$, per lo que $\mathbf{F}(\mathbf{q}, t)$ depèn de les propietats i forma de \mathbf{S} .

El mètode que s'utilitzarà en aquest treball, es tracta d'una variació del mètode IB més complex anomenat *Divergence-conforming immersed boundary method* (DCIB). En aquest mètode la discretització de les equacions es realitza mitjançant *divergence-conforming B-splines* basat en el mètode isogeomètric sorgit alhora del mètode d'elements finits que ens permet poder evitar la discretització de la delta de Dirac (14) complint en tot moment la conservació de massa i donant lloc així, a errors de incompressibilitat molt petits a nivell eulerià i major precisió a nivell lagrangià en comparació amb altres mètodes IB [5].

3 Diatomees

Les diatomees, del llatí *diátomos* “tallat per la meitat”, són el major grup d’algues existents al oceà, encara que es poden trobar pràcticament a qualsevol medi aquàtic, i dels quals forma part el fitoplàncton. Són organismes unicel·lulars eucariotes on la seva mida pot variar de 2 a 200 μm de diàmetre o longitud, presentant multituds de formes i geometries (Figura 2).



Figura 2: Imatge de diferent tipus de diatomees observades a través d’un micròscopi òptic [6].

La seva estructura consta de les parts típiques d’un organisme unicel·lular i una paret que envolta tota la cèl·lula anomenada frústula. Aquesta paret cel·lular consta de dues parts superposades anomenades valves, donant lloc a la geometria de la diatomea (Figura 3). D’aquesta manera les diatomees es classifiquen generalment en dos grans grups segons la seva simetria: les radialment simètriques (*diatomees pennades*) i bilateralment simètriques (*diatomees cèntriques*). A nivell unicel·lular, la frústula de les diatomees és única ja que està formada per Silici, concretament de SiO_2 , composta per una sèrie de capes a mode de nanoestructures lo que proporciona a la cèl·lula una estructura forta, dura però a la vegada porosa que li aporta nombrosos beneficis tals com la inhibició de la entrada de virus, protecció contra la ingesta de depredadors i una alta resistència a la ruptura [7]. Donada la gran varietat de diatomees que existeixen, al voltant de 100.000 d’espècies diferents, nombrosos estudis han demostrat [7] que la resposta mecànica de la frústula varia entre les espècies, trobant una relació directa amb la seva composició geomètrica i el medi en que es troben exposades.

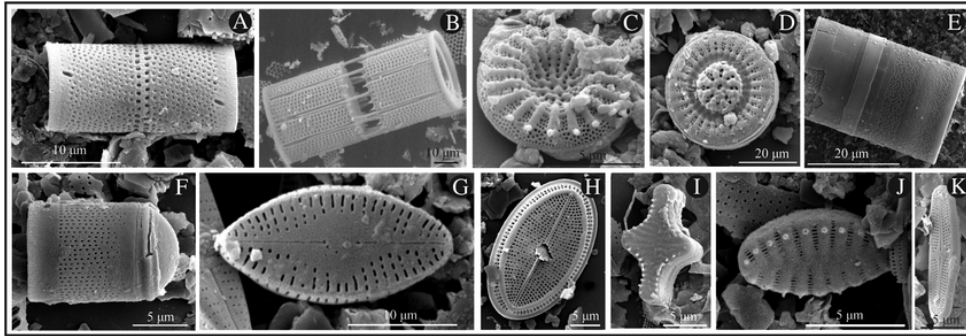


Figura 3: Imatge de la frústula de diferent tipus de diatomees observades a través d'un microscopi electrònic. A) *A. ambigua*, B) *A. granulata*, C) *Stephanodiscus* cf. *minutus*, D) *D. stelligera*, E) *Melosira undulata*, F) *Orthoseira dendroteres*, G) *D. confervacea*, H) *Cocconeis placentula*, I) *Staurosira construens*, J) *Staurosirella pinnata*, K) *A. minutissimum*. [8]

Aquests organismes són fonamentals per l'ecosistema, ja que al llarg de l'any són els encarregats de produir entre el 20-50% de l'oxigen que es genera a la Terra, es calcula que contribueixen un 45% de la producció primària de matèria orgànica al oceà [9], a més de fertilitzar subsòls com el de les Amazones gràcies al transport de corrents transatlàtics. S'ha pogut observar que tenen un paper molt important en la fixació del carboni i la regulació del cicle biogeoquímic del silici al oceà. Les colònies de diatomees sovint també s'utilitzen com indicador de les condicions ambientals així com la qualitat de l'aigua on es troben.

Generalment, les diatomees es mouen de forma passiva a través del fluid a causa dels corrents marins i les turbulències de l'aigua. A diferència de la majoria d'organismes del regne Protista que realitzen la fotosíntesis, les diatomees no disposen d'estructures de mobilitat com flagels o cilis. Per això, disposen de diferents mecanismes per tal de poder mantenir-se a la zona fòtica (capa superficial de l'aigua on arriba la llum del Sol), encara que la llum no és l'únic factor pel qual les diatomees disposen de mecanismes que els permet regular la seva flotabilitat de forma activa dins la columna d'aigua. La abundància de nutrients, la densitat de població, la temperatura, la salinitat, la reproducció i l'estrès provocat per el mateix moviment del fluid també són factors determinats. Alguns grups de diatomees presenten protuberàncies rígides a la frústula a mode d'espines i altres són capaços de formar cadenes de multituds d'elles que els permet incrementar la seva flotabilitat. Però el comportament que més destaca d'aquest organisme és que es capaç de regular de forma activa la seva densitat mitjançant un control fisiològic de la cèl·lula, on poden arribar inclús a assolir flotabilitat positiva [9]. Els dos principals mecanismes que s'han pogut observar són: la regulació d'acumulació de lípids i la regulació en l'intercanvi d'ions. Obtenint com a resultat a ambdós casos una variació en la seva densitat que els permet modificar la seva velocitat d'enfonsament en qüestió de segons [9].

3.1 Models mecànics

Donada la importància i complexitat d'aquest microorganisme, és d'interès estudiar aquest sistema simulant la seva resposta a estímuls mecànics externs posant de manifest quina importància pot tenir el model mecànic aplicat, ja que no en disposam d'un fidedigne a la realitat, i quines diferències s'observen en els resultats. En el nostre cas treballarem en dos models: càpsules i vesícules.

Definim les càpsules i les vesícules com a partícules microscòpiques que contenen un fluid viscos incompressible al seu interior i que estan envoltades per una interfície complexa. La principal diferència entre els dos models és el seu tipus de paret. Per una banda, les vesícules tenen una membrana fosfolípida de dues capes inextensible que oposa resistència a flexionar-se (*bending resistance*). En canvi, les càpsules estan envoltades per una membrana sòlida prima polimeritzada deformable, extensible, resistent a la tensió tallant (*shear resistant*), és a dir, a aquella força externa que actúa sobre la superfície de la paret en direcció paral·lela a aquesta [10]. Les equacions que descriuen ambdós models mecànics no les descriurem amb detall en aquest treball per motius d'espai i simplicitat però es poden trobar de forma extensa en els estudis de G. Boedec [25] i Barthès-Biesel [10].

Quan la força externa exercida es produïda per estressos del fluid, la solució al moviment i la deformació de la càpsula es torna un problema FSI bastant complex, ja que és tracta d'un problema no-clàssic degut a la inèrcia dels fluids. A més, es tracta d'un problema del tipus superfície lliure, on la posició de la paret de la càpsula és una incògnita i on pot haver grans desplaçaments i deformacions [10]. Els estressos hidrodinàmics són creats per els fluxes dels fluids interns i externs, per lo que s'han incloure per a la resolució de les equacions, juntament amb les mecàniques de la membrana i les condicions de acoblament [5].

4 Simulació i Resultats

Per realitzar les simulacions hem utilitzat el mètode DCIB [5] resolent les equacions de Navier-Stokes per a n° de Reynolds baixos en un espai 2D ($300 \mu\text{m}$ d'alçada x $200 \mu\text{m}$ d'altura) on s'han aplicat en els seus contorns les condicions, *No-penetration* (velocitat perpendicular del fluid zero) i *No-slip* (velocitat tangencial zero), i un pas de temps de $5 \cdot 10^{-5}\text{s}$. Per altre banda, per a la representació d'una diatomea s'han utilitzat els models mecànics per a una vesícula i una càpsula [5]. En primer lloc, analitzarem el comportament d'ambos models davant el fluid escollint una densitat fixa, tant per la paret com per l'interior de la partícula, major que de l'aigua (cal tenir en compte que les unitats de la densitat són kg/m^2 , ja que ens trobam a un espai 2D). I finalment, adoptarem el model mecànic més adient per simular la capacitat del microorganisme de regular la seva densitat.

4.1 Vesícula vs Càpsula

Per la representació d'una diatomea hem escollit una mida de $30\mu\text{m}$ de diàmetre, una viscositat, que a falta de valors tabulats, hem elegit que sigui 5 vegades la viscositat de l'aigua ($10^{-3}\text{Pa}\cdot\text{s}$ a 20°C) per poder simular la rigidesa característica de la diatomea. Per la seva forma, hem escollit la geometria cilíndrica (secció redona en 2D), ja que és una millor aproximació de la forma real d'una diatomea que una esfera [11].

Una de les limitacions que té el nostre mètode, és que donada l'alta rigidesa (*bending rigidity*) que tenen les diatomees (de l'ordre $10^6 - 10^9\text{Pa}$) [12], el mètode no convergeix ja que està dissenyat per simular sòlids biològics molt més flexibles com per exemple els globus vermells que tenen un *bending rigidity* de l'ordre de $10^{-11} - 10^{-13}\text{Pa}$. Per lo que el màxim valor que hem pogut imposar és de l'ordre de 10^{-8}Pa , molts d'ordres inferiors a la que presenten les diatomees. Aleshores, donat aquest problema si escollim el model per a una vesícula hem d'imposar-li que mantingui el seu perímetre constant, de manera que el que observarem serà que la vesícula (característica per *bending resistance* i inextensible) que inicialment és redona, mantindrà la seva forma al llarg del temps. Això és degut a que el contorn tancat de mínima energia és el cercle [13] i per tant, el cos no "voldrà canviar de forma" (veure Figura 4). D'aquesta manera aconseguim simular un sòlid que presenta rigidesa alta tal com ho són les diatomees.

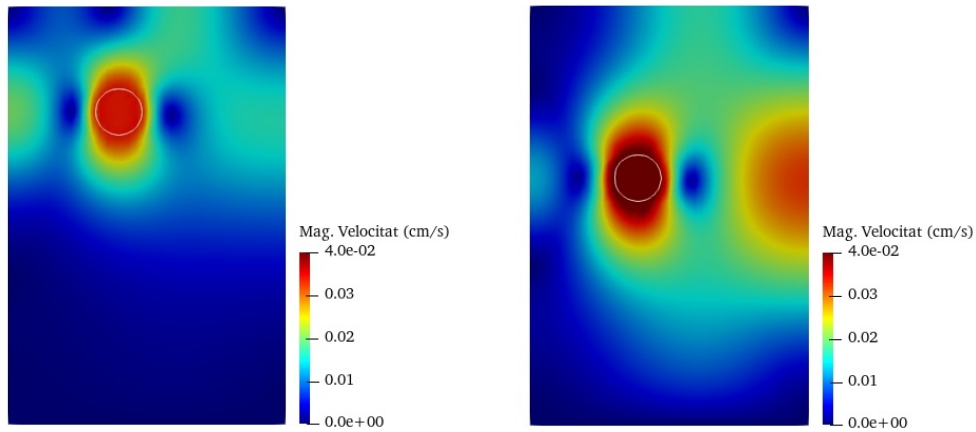


Figura 4: Vesícula redona (cilíndrica 3D) amb densitat de la pared i interior $\rho_1=1500 \text{ kg/m}^2$.

Per altre banda, les vesícules poden adoptar diferents formes geomètriques a un cost d'energia baix [10] per lo que si consideram una altre forma, donada la varietats de formes que tenen les diatomees (veure Figura 2 i la Figura 3), com per exemple una el·lipse veiem que aquesta sí que es deformarà (tenim un *bending rigidity* molt baix i la vesícula es negligible a la *shear resistance*) (Figura 5). Per lo que, només podrem disposar de diatomees cilíndriques com *A. ambigua*, *A. granulata* i *Melosira undulata* vistes a la Figura 2.

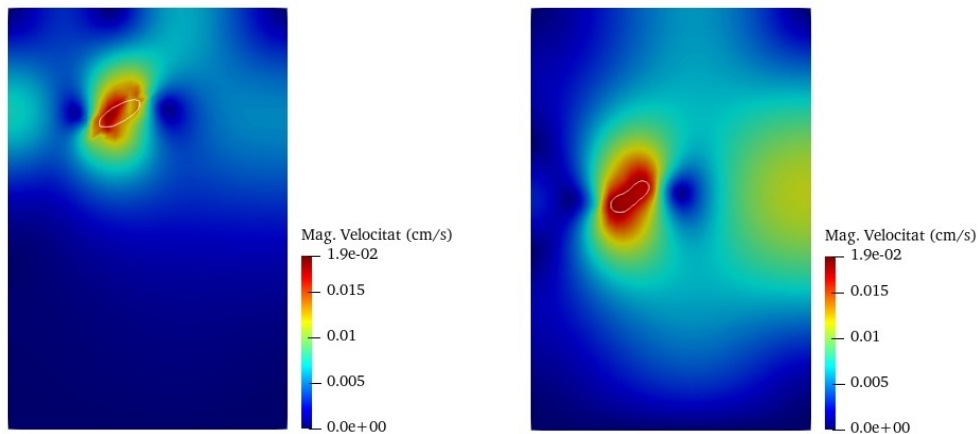


Figura 5: Vesícula el·líptica amb densitat de la pared i interior $\rho_1=1500 \text{ kg/m}^2$.

Per acabar de confirmar que realment el nostre model de vesícula redona es comporta com un cos rígid, el que farem serà simular dues vesícules amb densitats internes diferents a posicions diferents de la columna d'aigua de manera que puguin interactuar. La que té menor densitat ($\rho_1=330 \text{ kg/m}^2$) la situam més avall de la columna i la de major més amunt ($\rho_2=1500 \text{ kg/m}^2$) de manera que aquesta segona s'enfonçarà i "empenyarà" i desplaçarà a la primera (Figura 6). Però a pesar de la interacció (veure Figura 7), aquestes mantenen la seva forma per lo que simulen ser cossos rígids tal com volíem.

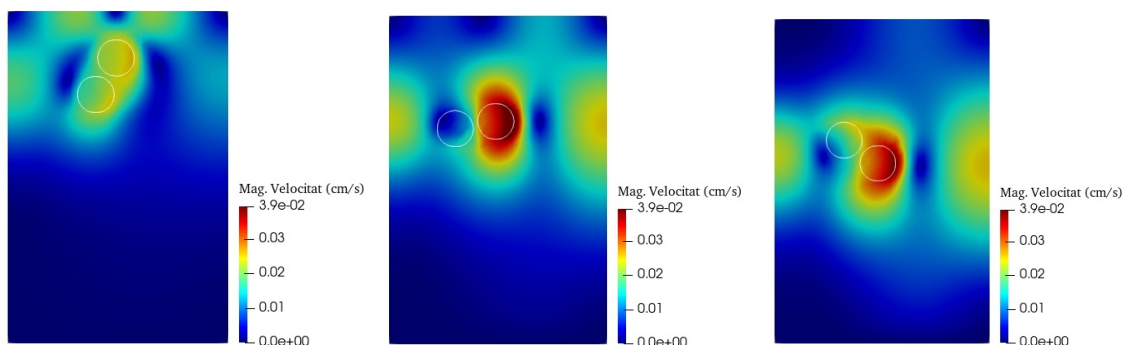


Figura 6: Evolució temporal de dues vesícules amb densitat fixes. Vesícula esquerra $\rho_1=330 \text{ kg/m}^2$; Vesícula dreta $\rho_2=1500 \text{ kg/m}^2$.

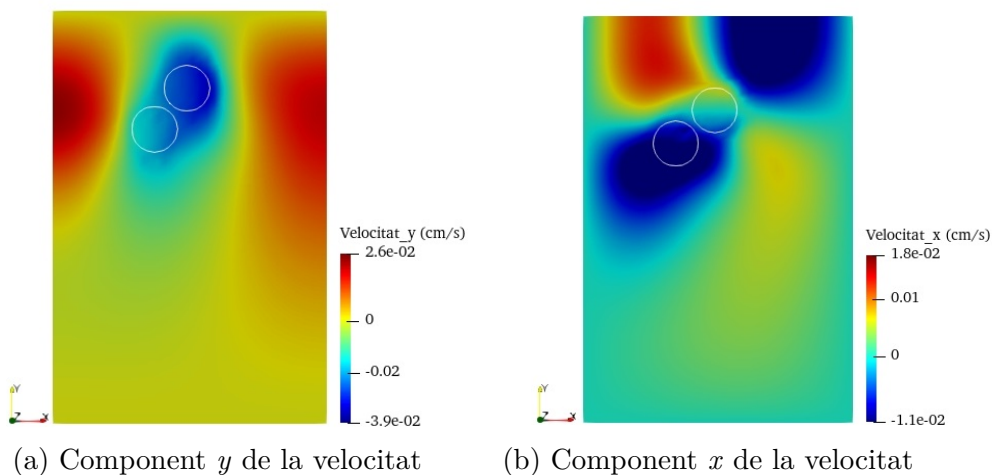


Figura 7: Components de la velocitat que il·lustra la interacció entre vesícules.

Aquestes vesícules no arribaran a tocar-se mai ja que dues línies de corrent no es poden creuar. Una partícula de fluid no pot tenir dues velocitats diferents a un mateix punt a excepció del límit de velocitat nul·la, i el sòlid es mou d'acord a les velocitats del fluid. La separació entre vesícules, dependrà de la resolució en que

estan discretitzades les equacions del fluid [5]. En el nostre cas, la resolució és baixa per una major rapidesa amb l'obtenció dels resultats sense que això signifiqui que es deixi de complir la condició d'incompressibilitat del fluid, arribant a valors màxims de divergència d'ordres de 10^{-6} cm/s, per lo que es segueix complint la conservació de massa i moment.

Una vegada hem testejat la rigidesa del model de la vesícula, anem a fer-ho per el model de la càpsula (partícula amb *shear resistance*, extensible). Per això, simularem directament dues càpsules redones amb un valor de *shear resistance* igual a 10^{-4} Pa amb densitats fixes diferents igual a les de les vesícules. El que podem observar és que les càpsules es deformen encara que inicialment siguin redones (Figura 8), ja que les càpsules són negligibles al *bending resistance* mitjançant l'estirament de la membrana a costa d'energia elàstica. Per lo que el model de càpsula no resultaria adequat per la representació d'una diatomea.

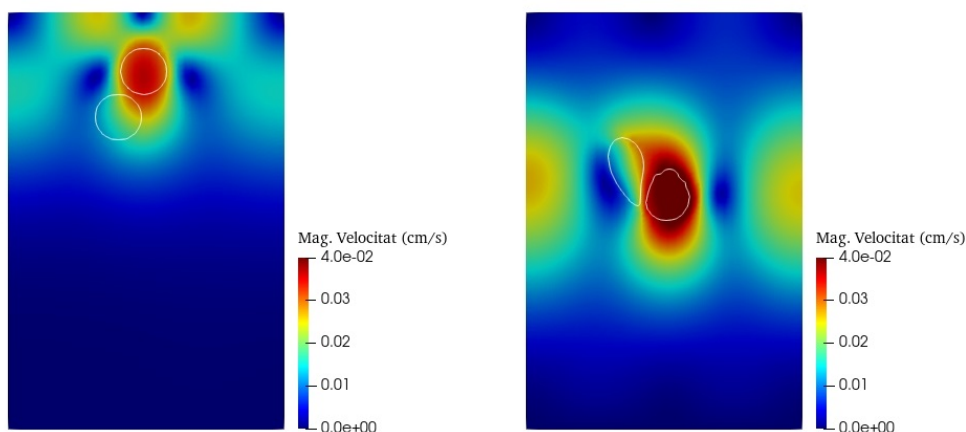


Figura 8: Càpsula esquerra $\rho_1=330$ kg/ m^2 ; Càpsula dreta $\rho_2=1500$ kg/ m^2 .

4.2 Flotabilitat dinàmica

Una vegada hem vist que el model mecànic de la vesícula redona (cilíndrica 3D) s'adapta millor a la representació del que seria una diatomea, anem a simular el comportament actiu que tenen aquests organismes produint canvis de densitat, és a dir, donant lloc a una flotabilitat dinàmica davant a estrès de cisallament degut al fluid.

Per representar aquest comportament adaptatiu de la densitat, aquesta variarà segons el valor absolut de l'estrès mitjà a lo llarg del perímetre de la diatomea. D'aquesta manera s'ha definit que davant a un augment de tensió tallant, la densitat augmenti i viceversa, tal com s'ha pogut observar experimentalment [14]. Aleshores, en primer lloc hem definit un valor llinar de tensió tallant (de l'orde de 10^{-6} Pa) per tal de

que es comencin a calcular les variacions de densitat una vegada el sistema ha sortit del repòs. De manera que quan el sistema assoleix aquest valor es calcula el canvi percentual que s'ha produït en l'estrès mitjà i aplicam el mateix canvi percentual a la densitat de la diatomea (tant interior com el de la membrana). Per evitar que les densitats es disparin tant per valors molts alts com per valors molt baixos, s'ha dividit per un factor 10 el canvi percentual de la densitat. Aquest nou comportament dinàmic l'implementam al model de dues vesícules redones amb densitats diferents. Les dues vesícules es troben en la mateixa configuració espacial de la Figura 6-7, i tenen una densitat inicial $\rho_{01} = 1050 \text{ kg/m}^2$ i $\rho_{02} = 1500 \text{ kg/m}^2$.

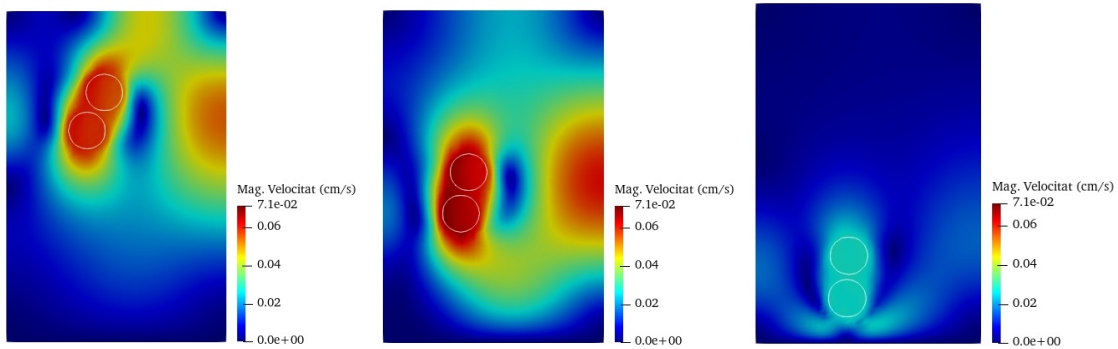


Figura 9: Evolució temporal de dues vesícules amb densitat dinàmica. Vesícula esquerra $\rho_{01}=1050 \text{ kg/m}^2$; Vesícula dreta $\rho_{02}=1500 \text{ kg/m}^2$.

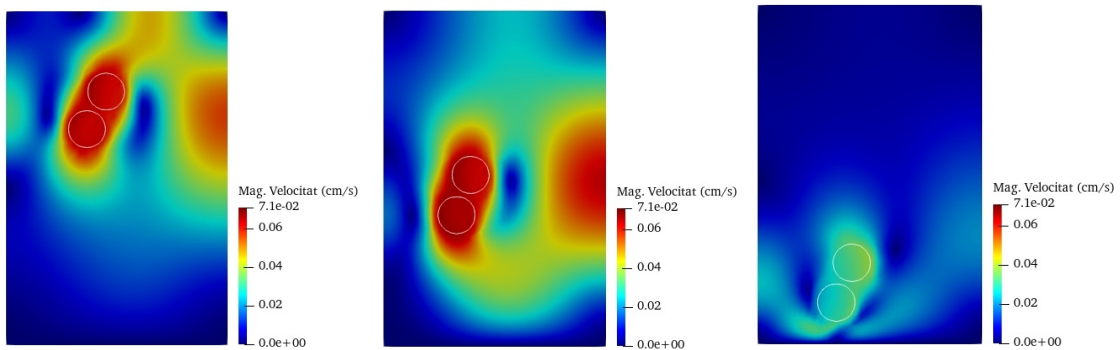


Figura 10: Evolució temporal de dues vesícules amb densitat fitxe. Vesícula esquerra $\rho_1=1050 \text{ kg/m}^2$; Vesícula dreta $\rho_2=1500 \text{ kg/m}^2$.

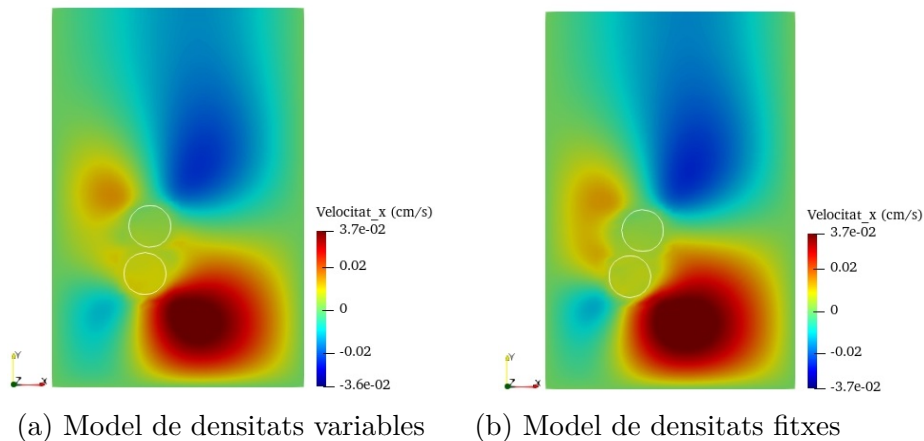


Figura 11: Comparació de la component x de la velocitat.

Si comparem pels mateixos instants de temps, el model de densitats variables amb el de densitats fixes agafant com a fixes les densitats inicials del model variable, podem observar un comportament lleugerament diferent (veure Figura 9 i 10). En primer lloc, es pot observar com la vesícula de densitats variables més densa mostra una major tendència a desplaçar-se lateralment per situar-se i mantenir-se al damunt sense separar-se de l'altre. Donada aquesta configuració, la de major densitat s'acostarà cada vegada més encara que no es pugui visualitzar degut a la resolució de la simulació. Per lo que aquest comportament actiu de regulació de la densitat podria explicar la formació de cadenes de diatomees, per la qual obtenen una major flotabilitat. Aquest fet no s'observa en el model de densitats fixes (Figura 11), on les dues vesícules no pareixen alinear-se per ajuntar-se. Al final d'aquesta simulació, es pot observar com el sistema va disminuint la seva velocitat (està frenant) a mesura que s'acosta al fons de la columna d'aigua, això és degut a la condició de contorn imposada (velocitat zero als contorns del domini del fluid). Però el que és de destacar, és que el sistema de densitats variables es capaç de frenar més ràpid ja que pot regular la seva densitat aconseguint reduir la seva velocitat de sedimentació.

Per altre banda, si representam la evolució de la densitat de cada una de les vesícules en funció del temps (veure Figura 12), es pot observar com aquestes tendeixen a regular la seva densitat de forma que cada vegada s'assemblen més a mode de sincronització, posant de manifest una possible adaptació al seu entorn més immediat (cada vegada estan més juntes). A més, es pot observar una certa tendència oscil·latòria tal com s'han observat a models de cadenes de diatomees [15] que a pesar de que les simulacions es duen a terme en intervals de temps de fraccions de segons, aquestes observacions pareixen traslladables raonablement a escales més grans. Un altre comportament a destacar és que ambdues vesícules arriben a assolir flotabilitat positiva tal com s'ha observat experimentalment en diatomees [9]. Finalment, com el sistema s'està apropant al fons, com hem mencionat anteriorment, les vesícules frenaran disminuint la seva densitat, ja que disminueix la velocitat i per tant l'estrès.

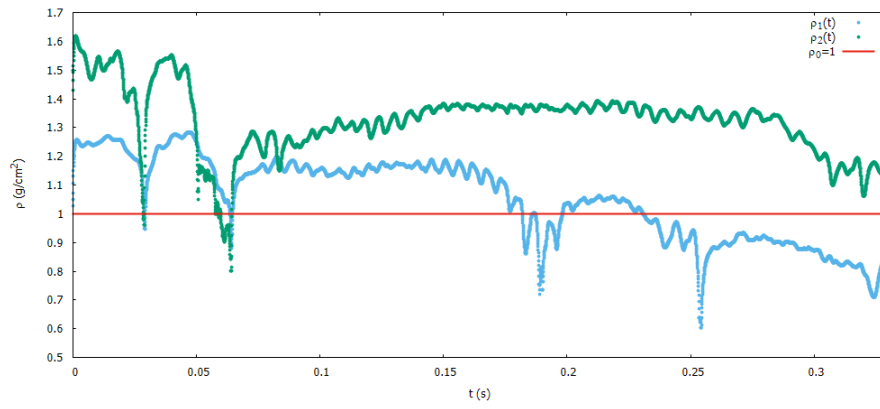


Figura 12: Evolució de les densitats per a dues vesícules de diferent densitat inicial degut a la tensió tallant.

5 Conclusió

A pesar de les limitacions del model que disposam, s'han obtingut resultats bastants interessants que permeten plantejar-se preguntes tal com si el comportament dinàmic de la densitat estaria intrínsecament lligat a la formació de cadenes de diatomees, les quals els permeten obtenir una major flotabilitat facilitant l'obtenció de nutrients o de llum per sobreviure. Per lo que en aquest sentit, també s'ha pogut observar un comportament d'adaptabilitat de l'entorn més proper posant així de manifest un control actiu de la cèl·lula [9]. A més, s'ha comprovat una disminució en la velocitat de sedimentació per lo que si comparem les velocitats de sedimentació obtingudes en les nostres simulacions amb dades recollides experimentalment [16] realitzant el factor de conversió adient, obtenim un màxim de velocitat de sedimentació al voltant de l'ordre de $62 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$. Tenint en compte les densitats estipulades per una diatomea ($\rho_{frústula} \approx 1400 - 2200 \text{ kg/m}^3$; $\rho_{citoplasma} \approx 1030 - 1100 \text{ kg/m}^3$) les nostres vesícules, amb densitat igual tant en la membrana com a l'interior, tendeixen assolir uns rangs de densitats $1100\text{-}1300 \text{ kg/m}^3$ (veure Figura 12) per lo que pareix raonable acceptar aquests valors com a vàlids per representar les velocitats de sedimentació observades experimentalment (veure Figura 13).

Particle type	Sinking speed (m d^{-1})	References	
Phytoplankton	Ultraplankton	<0.1–2	Bienfang (1980) ^{a)}
	Net plankton	<10–20	Smayda (1970) ^{a)}
	Diatoms	10–>70	Passow (1990) ^{a)}
	Diatoms	100–150	Brillett et al. (1983) ^{b)}
	Diatom frustule	71–100	Honjo & Manganini (1993) ^{b)}
	Algal aggregates	40–150	Smetacek (1985) ^{a)}
	Marine snow	1–368	Allredge & Silver (1988) ^{a)}
	Marine snow	112	Allredge & Gotschalk (1989) ^{c)}
	Aggregate	48–244	Van Leussen & Comelisse (1993) ^{c)}
	Mud aggregates	133	Ten Brinke (1994) ^{c)}
	Aggregate	86–259	Dyer et al. (1996) ^{c)}
	Aggregate	190	Hill et al. (1998) ^{c)}
	Aggregate	86–328	Stenberg et al. (1999) ^{c)}
	Protozoans	Foraminifera	30–4800
Radiolarians		350	Kuenen (1950) ^{a)}
Acantharia		600	Antia et al. (1993) ^{a)}
Zooplankton	Amphipoda	875	Smayda (1970) ^{a)}
	Chaetognata	435	Smayda (1970) ^{a)}
	Heteropoda	1400	Vinogradov (1961) ^{a)}
	Pteropoda	760–2270	Smayda (1970) ^{a)}
	Nauplii & copepodids	5–28	Paffenhoffer & Knowles (1979) ^{a)}
Fecal material	Crustaceae	20–150	Small et al. (1979) ^{a)}
	Salps	450–2700	Bruland & Silver (1981) ^{a)}
	Aggregate	100	Fowler & Knauer (1986) ^{a)}
	Fecal pellets	36–376	Smayda (1969) ^{b)}

Figura 13: Velocitats de sedimentació per a diferents microorganismes marins [16].

S'ha de tenir present que el model utilitzat en qüestió presenta molt de tipus de limitacions alhora de poder representar una diatomea més fidedigne a la realitat. Un dels principals problemes ha estat la divergència del mètode a valors característics del *bending resistance* de les diatomees on s'ha hagut d'utilitzar un valor molt ordres menors, tot i aquesta dificultat s'ha pogut solucionar imposant una forma redona (cilíndrica 3D) de perímetre constant obtenen a canvi una limitació en la forma de

les diatomees. Per altra banda, l'estructura de la membrana (frústula) és bastant complexa. Tal com hem comentat a la secció 3, a més de la seva gran rigidesa aquesta presenta porositat (irregular a lo llarg de la seva superfície) i capacitat de compressió per oposar-se a la flexió per lo que dóna lloc a un model mecànic difícil d'implementar. Una altra limitació important del model és que les diatomees no sembla que s'hagin d'aturar d'enfonsar-se (suposant una columna d'aigua infinitament llarga), això podria donar-se per la elevada densitat inicial d'una de les vesícules per lo que es tindria que estudiar per a diferents configuracions. Un altre factor a tenir en compte és que les nostres diatomees actuen davant la tensió tallant del fluid de forma immediata a escales de mil·lisegons, lo qual no resulta realista. Així doncs, es podria imposar la condició de que les densitats variïn en funció del *shear stress* només cada X passos de temps o implementar un model més realista introduïnt un mecanisme de resposta que sigui retardat i que el sistema de detecció d'estrès també pogués fer una mitjana dels valors de les oscil·lacions ràpides que es puguin produir. Els sistemes d'equacions amb retard són tot un camp d'estudi en si mateix sent clau per àmbits com la física del làser. Però això suposaria un temps de simulació majors i per tant un cost computacional també més gran per a ambdós casos.

A pesar de tot això, el codi funciona en tot moment d'acord a les equacions del continu i conserva la incompressibilitat del fluid a pesar de la baixa resolució amb que s'han discretitzat. A més de donar lloc a resultats que serien d'interès per ampliar futurs estudis sobre si la regulació dinàmica de la densitat podria explicar la formació de cadenes de diatomees així com proves experimentals per a diferents tipus de situacions.

Referències

- [1] Thesis of Alexander Rusch, Alexander Rusch Examiner, Hans-Joachim Bungartz Supervisor, and Dipl-Math Benjamin Uekermann. Munich School of Engineering Extending SU 2 to fluid-structure interaction via preCICE. (April), 2016.
- [2] Benzhuo Lu, Y. C. Zhou, Gary A. Huber, Stephen D. Bond, Michael J. Holst, and J. Andrew McCammon. Electrodiffusion: A continuum modeling framework for biomolecular systems with realistic spatiotemporal resolution. *Journal of Chemical Physics*, 127(13), 2007.
- [3] Constantin Christof. Department of Mathematics Bachelor-Thesis Immersed Boundary Methods : Simulation of Flows with Moving Elastic Boundaries and Application to Cardiac Fluid Dynamics authored by. (May), 2013.
- [4] Dartzi Pan. An immersed boundary method for incompressible flows using volume of body function. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 50(6):733–750, 2006.
- [5] Hugo Casquero, Yongjie Jessica Zhang, Carles Bona-Casas, Lisandro Dalcin, and Hector Gomez. Non-body-fitted fluid–structure interaction: Divergence-conforming B-splines, fully-implicit dynamics, and variational formulation. *Journal of Computational Physics*, 374:625–653, 2018.
- [6] Marine Scotland Monitoring Marine Phytoplankton - Marine Scotland.
- [7] L Dimas and Mj Buehler. Hierarchical Mechanics of Diatom Algae: From Atoms to Organism and Weakness to Strength. *Imechanica.Org*, 2:7–11.
- [8] Daniel Jaramillo, Diego Felipe Vallejo, María Isabel Vélez, Sergio Restrepo-Moreno, Andres Pardo-Trujillo, Raúl Trejos-Tamayo, Hugo Murcia, Min Kyoungwon, and Angel Barbosa-Espitia. Middle Pleistocene palaeolimnology of a dammed tropical river: The Zarzal Formation, Cauca Valley, Colombia. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, 487(August):194–203, 2017.
- [9] Brad J. Gemmill, Genesok Oh, Edward J. Buskey, and Tracy A. Villareal. Dynamic sinking behaviour in marine phytoplankton: Rapid changes in buoyancy may aid in nutrient uptake. *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences*, 283(1840), 2016.
- [10] Dominique Barthès-Biesel. Motion and Deformation of Elastic Capsules and Vesicles in Flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 48:25–52, 2016.
- [11] Kevin A. Miklasz and Mark W. Denny. Diatom sinking speeds: Improved predictions and insight from a modified Stoke’s law. *Limnology and Oceanography*, 55(6):2513–2525, 2010.

- [12] Lee Karp-Boss, Rachel Gueta, and Itay Rouso. Judging diatoms by their cover: Variability in local elasticity of *Lithodesmium undulatum* Undergoing Cell Division. *PLoS ONE*, 9(10), 2014.
- [13] Ian T. Young, Joseph E. Walker, and Jack E. Bowie. An analysis technique for biological shape. I. *Information and Control*, 25(4):357–370, 1974.
- [14] Pilar Roig Rotger. Mas allá de la ley de Stokes : sedimentación activa en fitoplanctón . 2018.
- [15] Johannes Srajer, Burhanuddin Y. Majlis, and Ille C. Gebeshuber. Microfluidic simulation of a colonial diatom chain reveals oscillatory movement. *Acta Botanica Croatica*, 68(2):431–441, 2009.
- [16] Andrew M.P. McDonnell and Ken O. Buesseler. Variability in the average sinking velocity of marine particles. *Limnology and Oceanography*, 55(5):2085–2096, 2010.
- [17] Kumari Priti Sinha, Sudip Das, Rahul Bapusaheb Karyappa, and Rochish M. Thakkar. Electrohydrodynamics of Vesicles and Capsules. *Langmuir*, 36(18):4863–4886, 2020.
- [18] Lars W.J. Anderson and Beatrice M. Sweeney. Diel changes in sedimentation characteristics of *Ditylum brightwelli*: Changes in cellular lipid and effects of respiratory inhibitors and ion-transport modifiers. *Limnology and Oceanography*, 22(3):539–552, 1977.
- [19] Zachary H. Aitken, Shi Luo, Stephanie N. Reynolds, Christian Thaulow, and Julia R. Greer. Microstructure provides insights into evolutionary design and resilience of *Coscinodiscus* sp. frustule. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 113(8):2017–2022, 2016.
- [20] Hugo Casquero, Carles Bona-Casas, Deepesh Toshniwal, Thomas J. R. Hughes, Hector Gomez, and Yongjie Jessica Zhang. The divergence-conforming immersed boundary method: Application to vesicle and capsule dynamics. c, 2020.
- [21] Zhong Feng Qiu, A. M. Doglioli, and F. Carlotti. Using a Lagrangian model to estimate source regions of particles in sediment traps. *Science China Earth Sciences*, 57(10):2447–2456, 2014.
- [22] Wei Xi Huang, Cheong Bong Chang, and Hyung Jin Sung. Three-dimensional simulation of elastic capsules in shear flow by the penalty immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, 231(8):3340–3364, 2012.
- [23] Yu Hau Tseng, Ping Huang, and Huaxiong Huang. An immersed boundary method for diatom sedimentation. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 13(2):216–225, 2016.

- [24] Angela Falciatore, Maurizio Ribera D’Alcalà, Peter Croot, and Chris Bowler. Perception of environmental signals by a marine diatom. *Science*, 288(5475):2363–2366, 2000.
- [25] Gwenn Boedec, Marc Leonetti, and Marc Jaeger. Isogeometric FEM-BEM simulations of drop, capsule and vesicle dynamics in Stokes flow. *Journal of Computational Physics*, 342:117–138, 2017.
- [26] Vojtech Kubac. Comparison of possible formulations of fluid-structure interactions with application in biomechanics. 2020.
- [27] Matteo Borgnino, Jorge Arrieta, Guido Boffetta, Filippo De Lillo, and Idan Tuval. Turbulence induces clustering and segregation of non-motile, buoyancy-regulating phytoplankton. *Journal of the Royal Society Interface*, 16(159), 2019.
- [28] F. Gross and E. Zeuthen. The buoyancy of plankton diatoms: a problem of cell physiology. (March):382–389, 1948.