

Università degli studi di Padova

Dipartimento di Fisica e Astronomia "Galileo Galilei"

Corso di Laurea Triennale in Fisica

Tesi di Laurea

**Interazioni idrodinamiche nella
sedimentazione di dispersioni colloidali**

Laureando: Aldo Tesser

Relatore: Prof. Enzo Orlandini

Anno accademico 2015-2016

Indice

1	Introduzione	1
2	Dinamica di un corpo in un fluido	3
2.1	Numero di Reynolds	3
2.2	Funzione di Green per l'equazione di Stokes	4
2.3	Il modello Stokeslet	7
3	Dinamica per la sedimentazione di più particelle	9
3.1	Sedimentazione per tre sfere	10
3.2	Sedimentazione per quattro sfere in un piano verticale	12
4	Simulazione della dinamica di un cluster	14
4.1	Perturbazione della configurazione stazionaria esagonale	14
4.2	Simulazione di un cluster di 150 elementi	17
5	Conclusioni	22
A	APPENDICI	24
A.1	Integrale (12)	24
A.2	Costante del moto per tre sfere	25

1 Introduzione

Quando si parla di miscele non costituite da una sola fase, per lo più si ha a che fare con una *fase dispersa* (solida, liquida o areiforme) in sospensione in una *fase o mezzo disperdente*. Questo però è un sistema ben differente da una normale soluzione. Nella soluzione infatti, il soluto è disperso uniformemente nel solvente in modo che non sia individuabile nessuna discontinuità nella miscela che quindi si può trattare come fisicamente omogenea. Il soluto nella soluzione è presente sotto forma di molecole o ioni di dimensione di $0.2nm - 1nm$, i quali per la loro ridotta grandezza non sono separabili dal solvente mediante filtrazione.

Prendiamo invece come esempio di fase dispersa un soluto che si separa da una soluzione omogenea mediante saturazione. Esso si presenta sotto forma di cristalli individuabili a occhio nudo o con normali microscopi ottici. Una miscela eterogenea così ottenuta è una *sospensione grossolana*. Una sospensione di questo tipo è riconoscibile perchè la sostanza che costituisce la fase dispersa è aggregata in particelle di dimensioni superiori a circa $1\mu m$. Queste particelle, a causa della loro dimensione cospicua rispetto alle normali dimensioni molecolari, sedimentano quando la sospensione è lasciata a riposo. Questo accade perché il moto Browniano e l'agitazione termica, che tenderebbero a tenere le particelle omogeneamente distribuite nel sistema, non sono efficaci nell'ostacolare l'azione gravitazionale.

Le sospensioni grossolane non hanno effetto sulle proprietà colligative perché la fase dispersa si comporta semplicemente come un insieme di piccoli corpi estranei.

Esiste però un'intera classe di miscugli nei quali le dimensioni delle particelle della fase dispersa sono comprese tra in nm e il μm . Queste vengono trattate, per il loro comportamento, in maniera separata sia dalle *soluzioni* sia dalle *dispersioni grossolane*. Esse rientrano sotto la classe delle *sospensioni colloidali*. Tra queste sostanze sono inclusi materiali molto noti, come il latte, la nebbia, la gelatina, polimeri, proteine etc. . .

Le proprietà delle sospensioni colloidali sono per molti aspetti differenti, e sono connesse con le dimensioni stesse delle particelle. Anche per i colloidali, sebbene non tendano a separarsi dalla fase dispersa analogamente a quanto fanno i normali soluti, si può provocare la sedimentazione effettuando processi di *centrifuga* o in altro modo, facendo depositare le particelle per mezzo dell'*elettroforesi*. L'elettroforesi avviene poiché all'interfaccia solido-liquido la superficie delle particelle è di solito elettricamente carica, in quanto queste ultime adsorbono ioni. Applicando infatti una differenza di potenziale tramite due elettrodi immersi nella sospensione, si osserva che le particelle migrano verso uno dei due elettrodi.

Che vantaggio c'è nello studiare la sedimentazione con un modello colloidale piuttosto che con un modello microscopico? Le interazioni per lo studio di un sistema colloidale hanno molti aspetti comuni alle interazioni di carattere microscopico

(forze di tipo potenziale come interazione dipolo-dipolo o interazione con campi esterni di tipo elettrico o magnetico), tuttavia poichè le particelle colloidali appartengono ad una scala mesoscopica, sono soggette anche ad interazioni tipiche della trattazione del *continuo*. Per la sedimentazione l'*interazione idrodinamica* è quella di maggior importanza.

Una particella in moto in un fluido viscoso induce un flusso che ha effetto nel moto delle altre particelle. Tipicamente i colloidi sono sistemi a bassi numeri di Reynolds, in cui le forze viscoso dominano sugli effetti inerziali. Nella dinamica è perciò predominante l'effetto di questa interazione a *lungo range* mediata dal solvente. In questa tesi studiamo gli effetti dell'interazione idrodinamica in sistemi soggetti ad un campo esterno.

Nella prima sezione ricaviamo innanzitutto le equazioni di Stokes come approssimazione adeguata delle equazioni di Navier-Stokes per sistemi con numero di Reynolds ≈ 0 . Dalle equazioni di Stokes poi otteniamo al primo ordine il campo di velocità prodotto da una particella che sedimenta tramite il *tensore di Oseen* che accoppia il moto di due o più particelle. Nella sezione successiva applichiamo l'interazione ai sistemi più elementari di sedimentazione, innanzitutto alla coppia di particelle che presenta una dinamica semplice di cui si conosce la forma analitica, per poi affrontare in seguito il problema delle tre particelle. Già con tre particelle, se la configurazione iniziale non gode di particolari simmetrie, si scopre la natura caotica dell'interazione idrodinamica e diventa necessario lo studio del problema tramite simulazioni numeriche. È stato affrontato inoltre, sempre nella seconda sezione, un sistema particolare a quattro particelle, nello studio del quale è interessante il confronto tra soluzione numerica e studio qualitativo delle equazioni differenziali. Si è potuto in questo modo testare i limiti e la bontà dell'algoritmo che poi è stato usato per la simulazione di un sistema più complesso.

Nella terza sezione infatti si vogliono studiare sistemi più grandi, per quanto riguarda il numero di particelle, la cui dinamica non evolve più solamente sul piano, ma si sviluppa in tre dimensioni. Per questa ultima sezione non è possibile uno studio di tipo analitico perciò l'analisi si appoggia interamente su simulazioni numeriche. Per primo si analizza un sistema che è la variazione di una configurazione stazionaria, cioè quella di un esagono disposto su un piano orizzontale, con una particella posta al centro. In questo sistema si vuole studiare come la particella centrale agisce sulla configurazione di equilibrio e la deforma. Alla fine invece si affronta un sistema di 150 elementi che può essere considerato come piccolo cluster di particelle, con interesse particolare di nuovo alla sua deformazione.

2 Dinamica di un corpo in un fluido

L'equazione della dinamica per un corpo, la cui posizione è determinata dal vettore \mathbf{r} , in un fluido Newtoniano è espressa, in componenti, dall'equazione

$$m \ddot{r}_i = \int_V \rho \phi_i dV + \int_{\partial\Sigma} T_{ij} \cdot d\Sigma_j \quad i = 1, 2, 3. \quad (1)$$

Il primo termine è relativo alle forze di volume. ϕ è un generico campo come, ad esempio, può essere la gravità per i fenomeni di sedimentazione o il campo elettrico per fenomeni di elettroforesi. Il secondo termine è relativo alle forze che agiscono sulla superficie del corpo. T_{ij} è un tensore di rango 2 simmetrico, detto tensore degli sforzi. Se indichiamo $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ il campo di velocità del fluido, il tensore degli sforzi ha la forma [1]:

$$T_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (2)$$

dove p è la pressione del fluido e μ la viscosità.

È possibile ottenere la forma analitica del campo di velocità $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ una volta risolte le ben note equazioni di Navier-Stokes per il nostro sistema

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) &= -\nabla p + \rho \phi + \mu \Delta \mathbf{u} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

con le relative condizioni al contorno. Deve annullarsi alla superficie la componente della velocità parallela ad una qualsiasi superficie \mathbf{u}_{\parallel} , e se la superficie è impermeabile, altrettanto deve valere per la componente ortogonale \mathbf{u}_{\perp} .

2.1 Numero di Reynolds

In particolare quando è un corpo microscopico a muoversi, nel fluido le forze dovute alla viscosità possono essere anche di diversi ordini più intense di quelle dovute all'inerzia. Questo ci suggerisce di scrivere le equazioni di Navier-Stokes per questo tipo di dinamica in una forma più semplice, facendo delle opportune approssimazioni. Per poter procedere però, è necessario fare delle considerazioni più generali. Trascuriamo per il momento la presenza di forze esterne ϕ di cui si tratterà nello specifico nelle prossime sezioni. Un qualsiasi tipo di moto è determinato dai parametri ρ e μ , che compaiono nelle equazioni di Navier-Stokes, da una velocità caratteristica U e dalla forma delle superfici su cui si impongono le condizioni al contorno. Riscalando il set di equazioni differenziali però si può vedere come in realtà, queste dipendano da un solo parametro adimensionale.

Sia l una dimensione caratteristica del moto ed eseguiamo il seguente riscalamento:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}' &= \frac{\mathbf{u}}{U} \\ \mathbf{r}' &= \frac{\mathbf{r}}{l} \\ p' &= \frac{p}{U^2 \rho} \\ t' &= \frac{Ut}{l}.\end{aligned}$$

Le nuove equazioni riscalate saranno

$$\frac{U^2 \rho}{l} \left(\frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla \mathbf{u}' \right) = -\frac{U^2 \rho}{l} \nabla p' + \frac{\mu U}{l^2} \Delta \mathbf{u}'.$$

Definiamo ora un nuovo parametro adimensionale $\mathcal{R} := \frac{\rho U l}{\mu}$ detto *numero di Reynolds*, dunque le equazioni senza apici si possono scrivere:

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \frac{1}{\mathcal{R}} \Delta \mathbf{u}. \quad (4)$$

È ora evidente una proprietà fondamentale delle equazioni di Navier-Stokes: le equazioni dipendono da un solo parametro \mathcal{R} . Questo si traduce nel fatto che sistemi con la stessa geometria e uguale numero di Reynolds, presentano lo stesso flusso, modulo un riscalamento. Questa è nota come *legge di similarità*. Si può ora confrontare il termine $\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$, che rappresenta le forze nel fluido dovute all'inerzia, con $\mu \Delta \mathbf{u}$, termine della forza viscosa. Si noti che il numero di Reynolds è proprio la stima al primo ordine di tale rapporto:

$$\mathcal{R} \sim \frac{|\text{forze inerziali}|}{|\text{forze viscosi}|}.$$

A buon ragione si può ora trascurare il termine $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ per tutti i tipi di flussi con *numeri di Reynolds* sufficientemente *bassi*. L'equazione della dinamica per flussi stazionari si riduce così ad un'equazione lineare chiamata *equazione di Stokes*

$$\begin{aligned}-\nabla p + \mu \Delta \mathbf{u} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0.\end{aligned} \quad (5)$$

2.2 Funzione di Green per l'equazione di Stokes

Discutiamo ora con la massima generalità l'azione di campi esterni $\phi(\mathbf{r})$ nell'equazione di Stokes. L'equazione che vogliamo risolvere è:

$$\begin{aligned}-\nabla p(\mathbf{r}) + \mu \Delta \mathbf{u}(\mathbf{r}) &= -\phi(\mathbf{r}) \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0,\end{aligned} \quad (6)$$

di cui la (5) rappresenta l'omogenea associata. Il metodo della funzione di Green si basa sulla linearità delle equazioni, e sfrutta il principio di sovrapposizione per trovare la soluzione generale del problema a prescindere dalla forma di $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{r})$. Dato che il valore di \mathbf{u} in \mathbf{r} dipende linearmente dai valori di $\boldsymbol{\phi}$ in tutti i punti dello spazio esprimiamo \mathbf{u} nella generica forma

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \int \mathbb{U}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

con $\mathbb{U}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ tensore incognito di rango due.

Lo stesso si può dire per p

$$p(\mathbf{r}) = \int \mathbf{P}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

con $\mathbf{P}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ tensore incognito di rango unitario. Possiamo dire di più sulla forma di questi tensori. Consideriamo infatti una forza esterna $\boldsymbol{\phi}$ che agisce sul fluido solamente in un singolo punto \mathbf{r}' , che scriviamo come $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\phi} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. È fisicamente sensato supporre che il valore di \mathbf{u} e p in \mathbf{r} dipendano solamente dalla distanza $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. La (5) muta ora in un'equazione per $\mathbb{U}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ e $\mathbf{P}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$,

$$\begin{aligned} \int [\nabla \mathbf{P}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - \mu \Delta \mathbb{U}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)] \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' &= \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}), \\ \int [\nabla \cdot \mathbb{U}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)] \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' &= 0, \end{aligned}$$

per l'arbitrarietà della $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{r})$ deve allora valere,

$$-\nabla \mathbf{P}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + \mu \Delta \mathbb{U}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = -\delta(\mathbf{r}). \quad (7)$$

L'equazione (7) identifica $\mathbb{U}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ e $\mathbf{P}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ come funzioni di Green associate all'equazione (5). Per risolvere la (7), la quale è un'equazione tensoriale, applichiamo la trasformata di Fourier ad ambo i membri,

$$-ik_i \hat{P}_j - \mu k^2 \hat{U}_{ij} = \delta_{ij}. \quad (8)$$

La condizione di incomprimibilità invece si scrive come

$$\sum_i k_i \hat{U}_{ij} = 0.$$

Moltiplicando l'equazione di Stokes nella forma tensoriale per k_i , e utilizzando l'incomprimibilità, eliminiamo la funzione di Green per la velocità e otteniamo

$$\hat{P}_j = -\frac{ik_j}{k^2},$$

che possiamo invertire direttamente per calcolare \mathbf{P}_j , l'antitrasformata,

$$\mathbf{P}_j = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \frac{k_j}{k^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (9)$$

È più semplice svolgere l'integrale in coordinate sferiche. Per fare questo prendiamo \mathbf{r} parallelo all'asse x_3 nello spazio delle $\hat{\mathbf{k}}$,

$$\mathcal{F}^{-1}[1/k^2] = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \int_{-1}^1 \frac{e^{ikr \cos \theta}}{k^2} d(\cos \theta) = \frac{2}{(2\pi)^2 r} \int_0^\infty d(kr) \frac{\sin kr}{kr} = \frac{1}{4\pi r}.$$

$\frac{1}{4\pi r}$ è già una soluzione nota, è la funzione di Green per il potenziale elettrostatico. Applicando il gradiente a questa funzione si nota che è uguale alla (9),

$$\nabla \left(\frac{1}{4\pi r} \right) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \frac{k_j}{k^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$

Perciò ora possiamo scrivere,

$$\mathbf{P}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = -\nabla \left(\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right). \quad (10)$$

È possibile usare l'espressione di $\hat{\mathbf{P}}_j$ nella (8), dove otteniamo un'espressione per il tensore $\hat{\mathcal{U}}_{ij}$,

$$\mu \hat{\mathcal{U}}_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{k^2} - \frac{k_i k_j}{k^4}. \quad (11)$$

Calcolando ancora la trasformata di Fourier ricaviamo \mathcal{U} . Il primo termine della trasformata è già stata calcolata per \mathbf{P} , perciò rimane da calcolare,

$$\mathcal{F}^{-1} \left[\frac{k_i k_j}{k^4} \right].$$

Dato che nello spazio delle $\hat{\mathbf{k}}$ la $\hat{\mathcal{U}}$ decresce come k^{-2} , significa che nello spazio \mathbf{r} risulta un'andamento asintotico r^{-1} . Inoltre l'espressione (11) è simmetrica rispetto allo scambio di i con j , perciò deduciamo una forma del tipo:

$$\mathcal{F}^{-1} \left[\frac{k_i k_j}{k^4} \right] = C_1 \frac{\delta_{ij}}{8\pi r} + C_2 \frac{x_i x_j}{8\pi r^3}.$$

L'ultima incognita rimasta sono ora le costanti C_1 e C_2 . Andando ad eseguire la traccia da entrambi i membri si ha $2 = 3C_1 + C_2$. Prendiamo ora $j = i = 3$ ed eseguiamo l'integrale in coordinate sferiche. Fissiamo di nuovo \mathbf{r} lungo x_3 nello spazio delle $\hat{\mathbf{k}}$,

$$\mathcal{F}^{-1} \left[\frac{k_3 k_3}{k^4} \right] = \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \frac{k_3^2}{k^4} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 0. \quad (12)$$

La risoluzione dell'equazione (12) è stata riportata in Appendice (A.1), dove si mostra che l'integrale è nullo, perciò la condizione per i coefficienti si traduce in $C_1 + C_2 = 0$. Dalle due condizioni sui coefficienti otteniamo:

$$C_1 = -C_2 = 1.$$

Siamo ora in grado di scrivere la forma delle funzioni di Green associate all'equazione (5),

$$\mathbb{U}_{ij} = \frac{1}{8\pi\mu} \left(\frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{r_i r_j}{r^3} \right), \quad \mathbb{U}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu r} \left(\mathbb{1} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right). \quad (13)$$

È possibile ricavare la funzione di Green dell'equazione di Stokes in diversi modi oltre a questo; si possono trovare in [2].

2.3 Il modello Stokeslet

Nei fenomeni macroscopici la perturbazione nel fluido circostante dovuta al moto di un corpo, interessa quasi esclusivamente le regioni strettamente prossime al corpo e la zona della scia. Ben diversa è invece la dinamica microscopica nella quale la regione di fluido interessata dal moto è molto più estesa (in unità di lunghezza caratteristica del corpo). Le interazioni sono perciò a lungo raggio ($\sim r^{-1}$) e diventano preponderanti nella dinamica di sedimentazione di sospensioni. Il modo più semplice per trattare questa interazione idrodinamica, caratteristica dei flussi a bassi numeri di Reynolds, è il modello Stokeslet. Seguendo questo procedimento ricaviamo la dinamica delle particelle a partire da un modello con sfere di raggio a . Sia a molto minore della distanza tra le sfere ($\frac{r}{a} \gg 1$), e sia la viscosità del fluido tale che $\mathcal{R} \left(\frac{r}{a} \right) \ll 1$. $\mathcal{R} \ll 1$ non è una condizione sufficiente per applicare l'equazione di Stokes al sistema quando la dimensione a è così piccola rispetto a r . L'equazione di Stokes per una sfera in moto uniforme in un fluido infatti è valida solo nella zona prossima ad essa ($r \sim a$), nel *far field* invece, per poter trascurare il contributo inerziale, si richiede la condizione di Oseen su $\mathcal{R} \left(\frac{r}{a} \right)$ [5]. Si suppone inoltre che il fluido e le particelle siano di densità comparabile. Questo ci permette, assieme al basso numero di Reynolds, di trascurare il transiente di tempo che la sfera impiega ad adattare la propria velocità in risposta ad una variazione di velocità del fluido.

Sotto queste assunzioni possiamo ricavare la distribuzione del campo di velocità prodotto da una particella che sedimenta. Il campo di velocità infatti si ricava integrando la soluzione all'equazione (5) per una sfera di raggio a , con tali condizioni al contorno: velocità uniforme \mathbf{u}_0 , fluido infinitamente esteso e in quiete all'infinito. Di fatto, trascurando i termini $\mathcal{O} \left(\frac{a^3}{r^3} \right)$ la forma del campo di velocità

è la stessa del campo generato da una forza puntuale che agisce nel centro della sfera nella direzione di \mathbf{u}_0 . Prendiamo una forza puntuale \mathbf{F}_0 diretta lungo $\hat{\mathbf{z}}$, allora dalla (2.2) la velocità è

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbb{U}(\mathbf{r})\mathbf{F}_0 = \frac{F_0}{8\pi\mu} \left(\frac{\hat{\mathbf{z}}}{r} + \frac{(\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{z}})\mathbf{r}}{r^3} \right), \quad (14)$$

che esprimiamo nelle componenti di $\mathbf{u} = (u, v, w)$:

$$w = \frac{F_0}{8\pi\mu} \left(\frac{1}{r} + \frac{z^2}{r^3} \right), \quad v = \frac{F_0}{8\pi\mu} \frac{zy}{r^3}, \quad u = \frac{F_0}{8\pi\mu} \frac{zx}{r^3}. \quad (15)$$

Ora se consideriamo che sia la sfera di raggio a a esercitare la forza, è necessario imporre che la media della velocità $(u, v, u_0 + w)$ si annulli sulla superficie [5].

$$\begin{aligned} u_{mean} &= \frac{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \frac{F_0}{8\pi\mu} \left(\frac{zx}{r^3} \right) a^2 \sin\theta}{4\pi a^2} = 0, \\ v_{mean} &= \frac{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \frac{F_0}{8\pi\mu} \left(\frac{zy}{r^3} \right) a^2 \sin\theta}{4\pi a^2} = 0, \\ w_{mean} &= \frac{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \frac{F_0}{8\pi\mu} \left(\frac{1}{r} + \frac{z^2}{r^3} \right) a^2 \sin\theta}{4\pi a^2} = \frac{F_0}{6\pi\mu}. \end{aligned}$$

Si può notare che i primi due integrali sono nulli per simmetria e dall'ultima equazione automaticamente otteniamo per la \mathbf{F}_0

$$u_0 + \frac{F_0}{6\pi\mu} = 0,$$

e cioè la ben nota formula di Stokes per la forza di drag

$$F_0 = -6\pi\mu a u_0.$$

Si può perciò riscrivere la perturbazione del campo di velocità generato da una sfera che si muove con velocità \mathbf{u}_0 della (14), nella forma [3]:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{3a}{4} \left(\frac{\mathbf{u}_0}{r} + \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{u}_0)\mathbf{r}}{r^3} \right). \quad (16)$$

3 Dinamica per la sedimentazione di più particelle

In questo capitolo si imposta dal punto di vista analitico l'analisi del comportamento di un cluster di particelle.

Consideriamo ora n particelle che sedimentano per l'azione della gravità e fissiamo l'asse $\hat{\mathbf{z}}$ in direzione verticale discendente. Esse avrebbero tutte la stessa velocità $\mathbf{u}_0 = (2\sigma a^2 g / 9\mu)\hat{\mathbf{z}}$ se non interagissero tra loro, dove σ è la differenza tra densità della sfera e del fluido. Ma la particella j -esima genera una perturbazione $\mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ nel punto \mathbf{r} , dove $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ è data dalla (16), e così per la linearità delle equazioni la distribuzione del campo di velocità sarà $\sum_{j=1}^n \mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$. In questo modo la particella i -esima nella posizione r_i sarà soggetta ad un flusso di velocità dovuto alle restanti $n-1$ particelle $\sum_{j \neq i}^n \mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$. In questo modo la forza che agisce su una sfera che muove con velocità \mathbf{u}_0 in presenza di $n-1$ sfere, sempre con velocità \mathbf{u}_0 , si scrive

$$-6\pi a\mu \left[\mathbf{u}_0 - \sum_{j \neq i}^n \mathbf{u}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right].$$

È conveniente riscrivere l'equazione nelle unità naturali del problema, prendendo come unità di lunghezza a il raggio delle sfere, e u_0 come unità di velocità; dunque l'equazione adimensionale del bilanciamento delle forze per ogni sfera è [3]:

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \hat{\mathbf{z}} + \sum_{j \neq i}^n \mathbf{u}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (17)$$

che restituisce un set completo di equazioni differenziali per le traiettorie $\mathbf{r}(t)$ delle n particelle. Possiamo notare che le equazioni della (17) sono invarianti sotto la trasformazione $t \rightarrow -t$, $\mathbf{u}_0 \rightarrow -\mathbf{u}_0$, e di conseguenza lo sono anche sotto la trasformazione $t \rightarrow -t$, $\mathbf{r}_i \rightarrow -\mathbf{r}_i$ a \mathbf{u}_0 fissato. In questo senso possiamo dire che il sistema è time reversal, come tutti i sistemi con $\mathcal{R} \sim 0$. Il flusso delle equazioni differenziali (17) conserva inoltre la misura nello spazio delle fasi, $\sum_i \nabla_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i = 0$, ciò nonostante il campo non è Hamiltoniano, poiché il sistema è dissipativo.

È facile vedere da (16) che $\mathbf{u}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \mathbf{u}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$ di conseguenza se $n = 2$, dato che la velocità di entrambe le sfere è la stessa, la configurazione iniziale rimane identica in tutto il moto. La coppia di sfere si muove in una direzione intermedia tra la linea congiungente i due centri e l'asse verticale. La presenza di una componente di drift orizzontale durante la caduta è ragionevole dato che la resistenza che produce il fluido sul moto delle sfere è maggiore quando sono adiacenti, piuttosto che se fossero in linea verticale.

3.1 Sedimentazione per tre sfere

Il moto relativo delle sfere nella sedimentazione non è affetto dal primo termine della (17). Effettuando un riscalamento sul tempo, con $n = 3$, il moto relativo è dato dall'equazione vettoriale

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_{12}}{dt} &= \left(\frac{1}{r_{13}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{13}}{r_{13}^3} \mathbf{r}_{13} \right) - \left(\frac{1}{r_{23}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{23}}{r_{23}^3} \mathbf{r}_{23} \right) \\ \frac{d\mathbf{r}_{23}}{dt} &= \left(\frac{1}{r_{21}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{21}}{r_{21}^3} \mathbf{r}_{21} \right) - \left(\frac{1}{r_{31}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{31}^3} \mathbf{r}_{31} \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Si può trarre da queste equazioni un importante risultato.

Sia $\Delta = \frac{\mathbf{r}_{12} \times \mathbf{r}_{32}}{2}$, il vettore area del triangolo che ha per vertici le tre sfere, la derivata temporale di Δ è

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta}{dt} &= \frac{1}{2} \left(\frac{d\mathbf{r}_{12}}{dt} \times \mathbf{r}_{32} \right) + \frac{1}{2} \left(\mathbf{r}_{12} \times \frac{d\mathbf{r}_{32}}{dt} \right) = \\ &= \mathbf{z} \times \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}} + \frac{\mathbf{r}_{23}}{r_{23}} + \frac{\mathbf{r}_{31}}{r_{31}} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

dove i conti espliciti sono riportati in Appendice (A.2). Da (19) è facile vedere che $\frac{d\Delta}{dt} \cdot \mathbf{z} = 0$, cioè la proiezione orizzontale del triangolo formato dalle tre sfere ha area costante. È perciò evidente che tre sfere inizialmente disposte in linea rimarranno sempre nello stesso piano verticale.

Se prendiamo $\hat{\mathbf{x}}$ nella direzione orizzontale del piano su cui si svolge il moto, possiamo riscrivere l'equazione (18) nelle coordinate relative, $(x_1, z_1), (x_2, z_2)$, di due particelle rispetto alla terza. La (18) si riduce dunque a

$$\begin{aligned} \frac{dz_1}{dt} &= \frac{2(z_1 - z_2)^2 + (x_1 - x_2)^2}{r_3^3} - \frac{2z_2^2 + x_2^2}{r_2^3} \\ \frac{dz_2}{dt} &= \frac{2(z_1 - z_2)^2 + (x_1 - x_2)^2}{r_3^3} - \frac{2z_1^2 + x_1^2}{r_1^3} \\ \frac{dx_1}{dt} &= \frac{(z_1 - z_2)(x_2 - x_1)}{r_3^3} - \frac{z_2 x_2}{r_2^3} \\ \frac{dx_2}{dt} &= \frac{(z_1 - z_2)(x_1 - x_2)}{r_3^3} - \frac{z_1 x_1}{r_1^3}, \end{aligned} \quad (20)$$

dove $r_1^2 = z_1^2 + x_1^2$, $r_2^2 = z_2^2 + x_2^2$, $r_3^2 = (z_1 - z_2)^2 + (x_1 - x_2)^2$, e le condizioni iniziali: $z_1 = z_2 = 0$, $x_1 = 1$, $x_2 = c$, studiato per $1 \leq c < \infty$.

L'equazione è stata risolta numericamente con un algoritmo Runge-Kutta del quarto ordine [8]. Un esempio di risultato è stato riportato in figura 1.

Tutte le prove con tre particelle mostrano un'evoluzione a due stadi. Nel primo

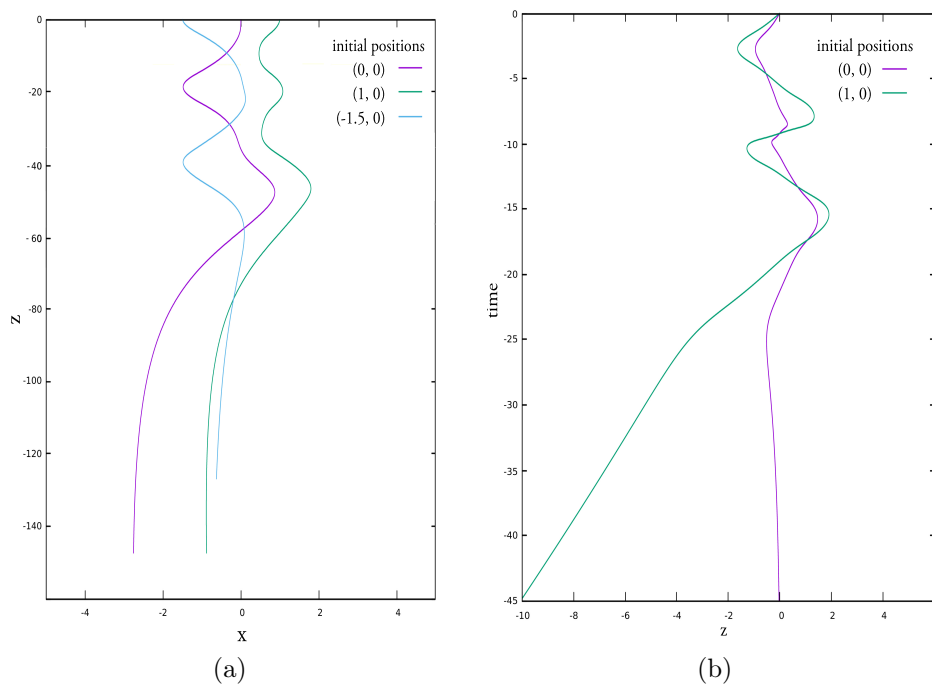


Figura 1: Soluzione numerica delle equazioni (20) per tre particelle allineate orizzontalmente. L'algoritmo (Runge-Kutta 4° ordine) calcola 3000 steps dalla configurazione iniziale Blue $(-1.5, 0)$, Purple $(0, 0)$, Green $(1, 0)$ per 30 tempi di Stokes. Nella figura (a) si trova il plot delle traiettorie delle particelle. Si nota il carattere caotico dell'interazione idrodinamica che provoca il "mixing" nello spazio delle configurazioni. Nella figura (b) sull'asse delle ascisse si trova la coordinata z delle due particelle esterne rispetto a quella centrale, mentre sull'asse delle ordinate il tempo. La configurazione iniziale è: Purple $(-1.4, 0)$, Green $(1, 0)$. Si nota che dopo una fase di interazione, nella quale le particelle sono abbastanza vicine, la particella sulla destra (Green) si distacca e rimane arretrata.

stadio le particelle rimangono vicine ed il loro moto è fortemente accoppiato, ad un certo punto una delle tre sfere rimane indietro e accresce la distanza dalla coppia che prosegue più velocemente. In questa fase le traiettorie diventano più regolari fino a diventare rettilinee. In questa configurazione finale il sistema si separa in due sistemi indipendenti e noti: una particella isolata e una coppia di particelle [3] [7]. Quale sia la particella che venga lasciata indietro dipende ovviamente dalla configurazione iniziale, cioè da c . Si è notato che nell'intervallo $1.2 < c < 2$ la che si distacca cambia anche per piccole variazioni di c , infatti il tempo di interazione in cui avviene il "mixing" delle particelle, in questo range varia sensibilmente.

3.2 Sedimentazione per quattro sfere in un piano verticale

Studiamo ora la dinamica, seguendo quanto fatto in [4], di quattro sfere inizialmente su di un piano verticale con configurazione simmetrica rispetto ad un asse verticale. Il moto, poichè il tensore di Oseen non ha componenti fuori dal piano, rimane 2D e mantiene inoltre la simmetria lungo tutto il moto. Prendendo l'origine sull'asse di simmetria e l'asse \hat{z} sempre diretto verticale discendente, possiamo scrivere le coordinate delle sfere come $(x_1, z), (x_2, 0), (-x_1, z), (-x_2, 0)$ e l'equazione del moto diventa

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= z \left[\frac{x_2 + x_1}{((x_2 + x_1)^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{x_2 - x_1}{((x_2 - x_1)^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} \right] \\ \frac{dx_2}{dt} &= z \left[\frac{x_2 + x_1}{((x_2 + x_1)^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{x_2 - x_1}{((x_2 - x_1)^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} \right] \\ \frac{dz}{dt} &= \frac{1}{2x_1} - \frac{1}{2x_2}.\end{aligned}\tag{21}$$

Possiamo però esprimerla più semplicemente effettuando la trasformazione $x_1 + x_2 = x, \quad x_2 - x_1 = y, \quad t' = 2t$

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{-yx}{(y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{-xz}{(x^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} \\ \frac{dz}{dt} &= \frac{y}{x^2 - y^2}.\end{aligned}\tag{22}$$

La configurazione iniziale è $z = 0, y = c, 0 < c < 1$ da cui è chiaro che la distanza iniziale tra le due sfere esterne è $1 + c$ mentre tra quelle interne $1 - c$.

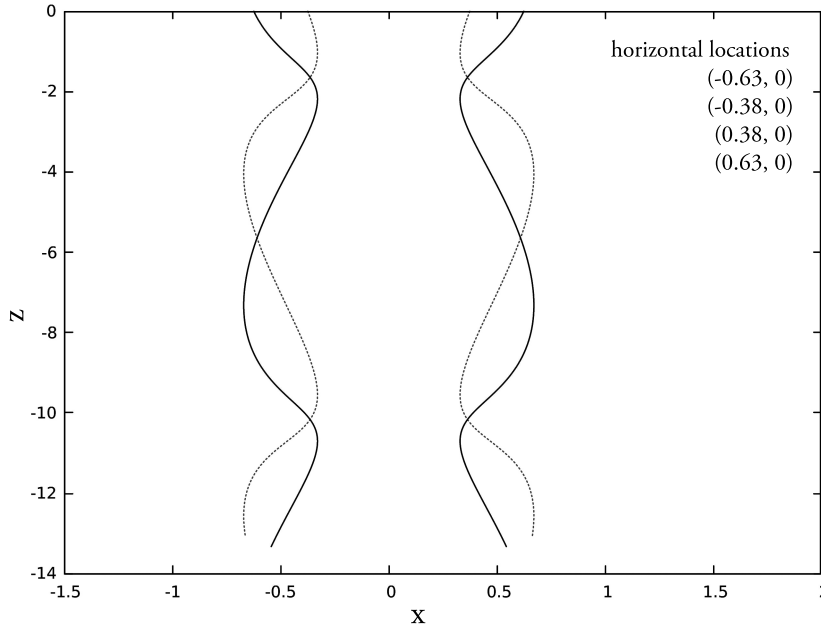


Figura 2: Soluzione numerica delle equazioni (22) per quattro particelle allineate orizzontalmente. L'algoritmo (Runge-Kutta 4° ordine [8]) calcola 2000 steps dalla configurazione iniziale $(-0.63, 0)$, $(-0.38, 0)$, $(0.38, 0)$, $(0.63, 0)$ per 10 tempi di Stokes. Il grafico riporta le traiettorie, periodiche nella componente x , delle quattro particelle durante la sedimentazione.

Innanzitutto si nota che se $x = \pm y$ ad un qualsiasi istante, dall'equazione (22), $x = \pm y$ a tutti gli istanti successivi; da ciò $x \pm y$ è sempre positivo o sempre negativo. Nel nostro caso $x + y > 0$, $x - y > 0$. Inoltre è facile dimostrare che $y(t)$ e $x(t)$ sono funzioni pari, mentre $z(t)$ è funzione dispari. Supponiamo ora che ad un certo istante $T > 0$ $z(T) = 0$, e siano $\bar{x} = x(T)$ e $\bar{y} = y(T)$, di conseguenza, per la parità delle funzioni z, x, y , allora $z(-T) = 0$, $x(-T) = \bar{x}$, $y(-T) = \bar{y}$, e la soluzione è periodica con periodo $2T$. Per questo tipo di moto le due coppie di sfere, la coppia delle sfere inizialmente interne e quella di sfere inizialmente esterne, oscillano in direzione orizzontale, mentre la componente di ogni coppia ruota attorno alla componente dell'altra, sia a destra che a sinistra dell'asse, durante la caduta. Se invece $z \neq 0$ per ogni $t > 0$, $z > 0$ e $y(t)$ è una funzione monotona decrescente. Se ad un certo istante \bar{t} , $dz/dt = 0$ allora per $t < \bar{t}$, dz/dt e d^2z/dt^2 saranno entrambe negative e z deve andare a zero. Per questo motivo allora $dz/dt \neq 0$ e allora $y > 0$. Dal momento che $y(t)$ è funzione monotona decrescente, sempre maggiore di zero, significa che deve tendere ad un limite $0 \leq \alpha < c$, anche $x(t)$ tende ad un limite $\alpha \leq \beta < 1$, e z tende all'infinito. In questo tipo di moto invece le sfere interne cadono assieme, lasciando indietro la coppia esterna che scende più lentamente.

È stata fatta una simulazione sempre con algoritmo Runge-Kutta al quarto or-

dine [8] partendo dalla configurazione $(-0.63, 0)$, $(-0.38, 0)$, $(0.38, 0)$, $(0.63, 0)$, di cui abbiamo in Figura 2 le traiettorie. Nel confronto tra soluzione numerica e studio qualitativo delle equazioni differenziali sono apparse le soluzioni periodiche ricavate analiticamente. Questo test sulla stabilità dell'algoritmo utilizzato è importante per poter procedere alla simulazione di un sistema più complesso.

4 Simulazione della dinamica di un cluster

4.1 Perturbazione della configurazione stazionaria esagonale

Dall'equazione (17) si può vedere che, se più di due particelle sono disposte su un piano orizzontale ai vertici di un poligono regolare, allora formano una configurazione stazionaria [4]. Sono state simulate numericamente delle perturbazioni alla configurazione stazionaria esagonale inserendo una particella al centro dell'esagono. Non è stata scelta come configurazione iniziale quella esagonale con particella perfettamente al centro, perchè la configurazione esagonale in questo caso collassa. Collassando infatti le particelle si trovano in una condizione lontana dall'approssimazione di Stokeslet, approssimazione valida quando le particelle sono a grande distanza tra loro. Si è provato a fare un run con questa disposizione, ma come ci si aspettava la simulazione ha dato risultati non fisici. Il tensore di Oseen infatti diverge quando la distanza tende a zero.

Al fine di studiare più in dettaglio la deformazione causata dalla particella centrale alla configurazione stazionaria si è calcolato il *Raggio di girazione*:

$$R_{girazione}^2 = \sum_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{CM})^2,$$

dove \mathbf{r}_{CM} è il baricentro del cluster (\mathbf{r}_{CM} è anche il centro geometrico dato che le particelle hanno tutte la stessa massa).

Per poter differenziare la deformazione distinguiamo R_{gt} il raggio di girazione nella sezione trasversale, da R_{gv} raggio di girazione lungo l'asse verticale (l'asse z):

$$R_{gt}^2 = \sum_i (x_i - x_{CM})^2 + (y_i - y_{CM})^2, \quad R_{gv}^2 = \sum_i (z_i - z_{CM})^2.$$

Osservando la Figura 3 si nota che questo particolare tipo di cluster elementare esegue nella sedimentazione, delle pulsazioni sia nella direzione del moto che sul piano orizzontale al moto. Sono state fatte due simulazioni numeriche di questo tipo di configurazione, entrambe con sei particelle a distanza unitaria dal centro

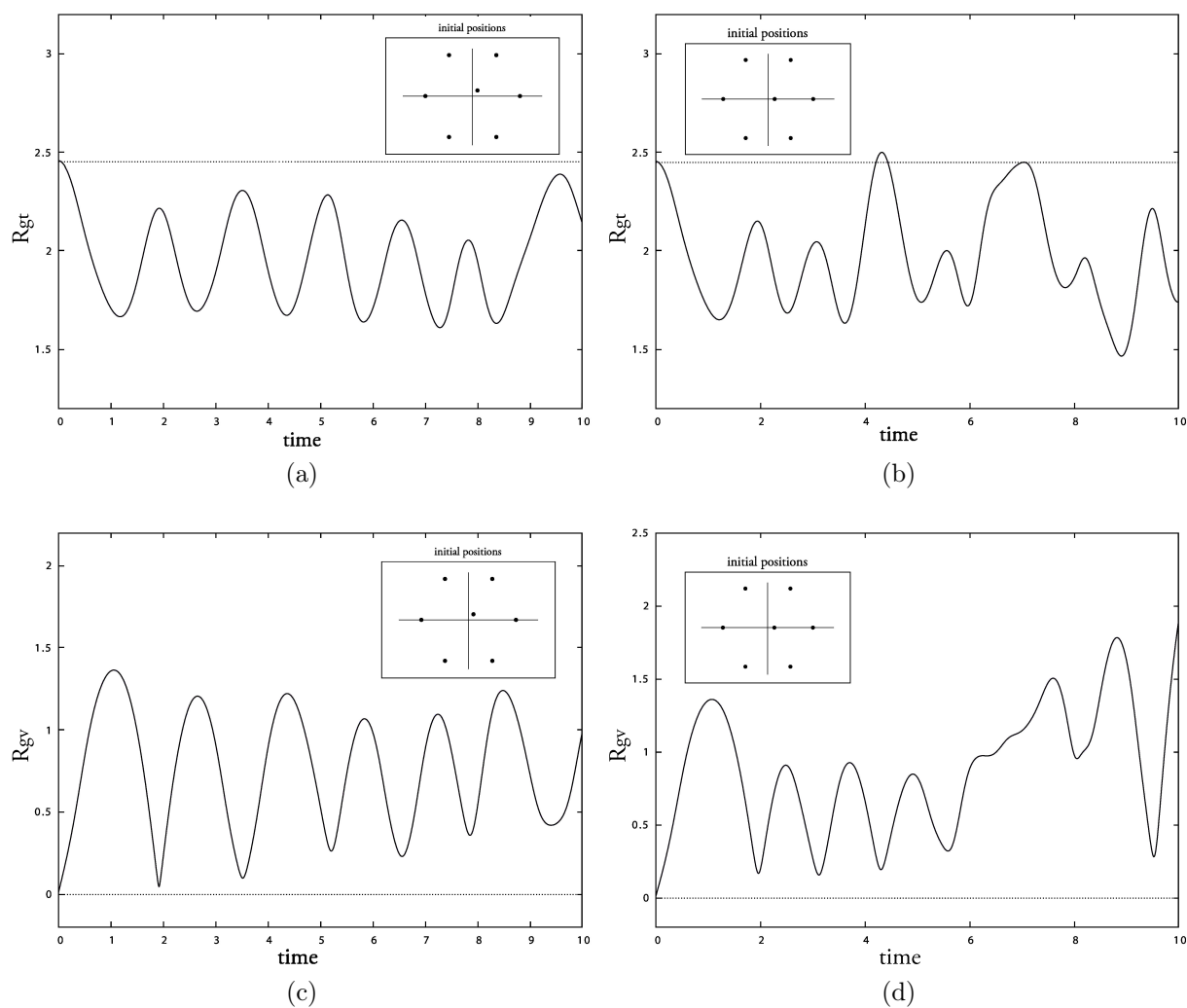


Figura 3: Troviamo graficati in alto R_{gt} , il raggio di girazione nella sezione trasversale, e in basso R_{gv} , quello lungo l'asse verticale, per 7 particelle disposte ad esagono con una particella centrale. Sono stati calcolati a partire dalla soluzione numerica delle equazioni (17) per due configurazioni iniziali diverse riportate nell'inset. Sulla destra, (a) e (c), con la particella centrale in $(1.2, 1.2)$, sulla sinistra (b) e (d) con la particella centrale in $(1.5, 0)$. I plot sono messi a confronto con il valore calcolato per la stessa configurazione senza particella centrale (linea tratteggiata).

ad angoli di 60° . Per la particella al centro invece, nella prima simulazione è posta nel punto $(0.12, 0.12)$ e nella seconda nel punto $(0.15, 0)$. La pulsazione, sempre osservando la Figura 3, continua per circa 10 tempi di Stokes nel primo esempio di deformazione, mentre si distorce già prima, circa 6 tempi di Stokes, nel secondo esempio.

Quali sono le differenze tra questi due tipi di configurazioni di cluster? È difficile prevedere la natura della differenza di comportamento tra queste due geometrie iniziali avendo fatto solamente queste due prove. le due configurazioni iniziali differiscono di poco in R_{gt} eppure sembra che la configurazione sulla sinistra di Figura 3 sia decisamente più stabile. Sarebbe sicuramente interessante continuare lo studio in maniera sistematica su questa geometria cercando di individuare un parametro di deformazione significativo per la stabilità.

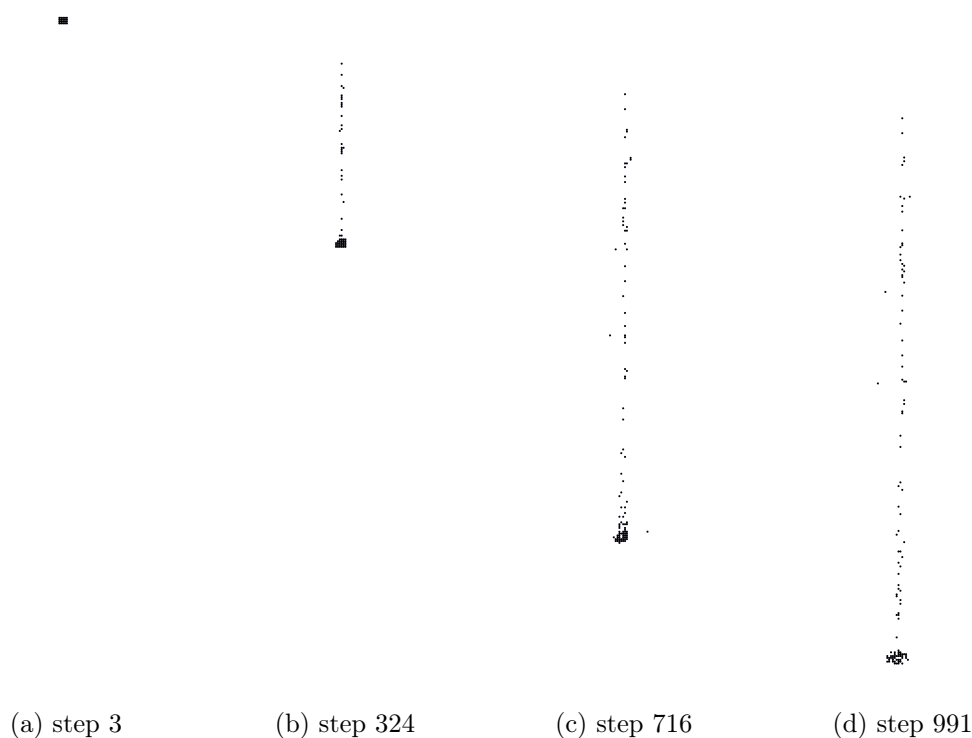


Figura 4: Soluzione numerica delle equazioni (17) per 150 particelle con distribuzione iniziale casuale e uniforme nella regione delimitata da un cubo $10 \times 10 \times 10$. L'algoritmo (Runge-Kutta 4° ordine) calcola 1000 steps per 50 tempi di Stokes come simulazione del comportamento di un piccolo cluster. Nel moto il cluster si deforma dalla forma iniziale, in particolare lasciando dietro a sé una "scia" di particelle che procedono più lentamente.

4.2 Simulazione di un cluster di 150 elementi

Abbiamo voluto trattare anche un sistema più simile a quello che può essere un cluster reale. Le particelle sono questa volta disposte casualmente con distribuzione uniforme in una regione di spazio a forma cubica. In questo sistema partecipano alla dinamica 150 particelle in configurazioni differenti che variano per n la densità di particelle.

Si nota che il core del cluster procede più veloce e compatto delle particelle nella periferia, che invece tendono a rimanere indietro. Questo processo diventa evidente se si prolunga il tempo della simulazione (Figura 4) e per 50 tempi di Stokes questo fenomeno è decisamente evidente.

Ora analizziamo la deformazione da un punto di vista quantitativo. La Figura 5 mostra il raggio di girazione verticale e quello trasversale per tre diversi valori di n , rispettivamente: 0.087, 0.150 e 0.293. Si può vedere dal grafico (a) che la deformazione lungo z è crescente ed uniforme nel tempo, a differenza della

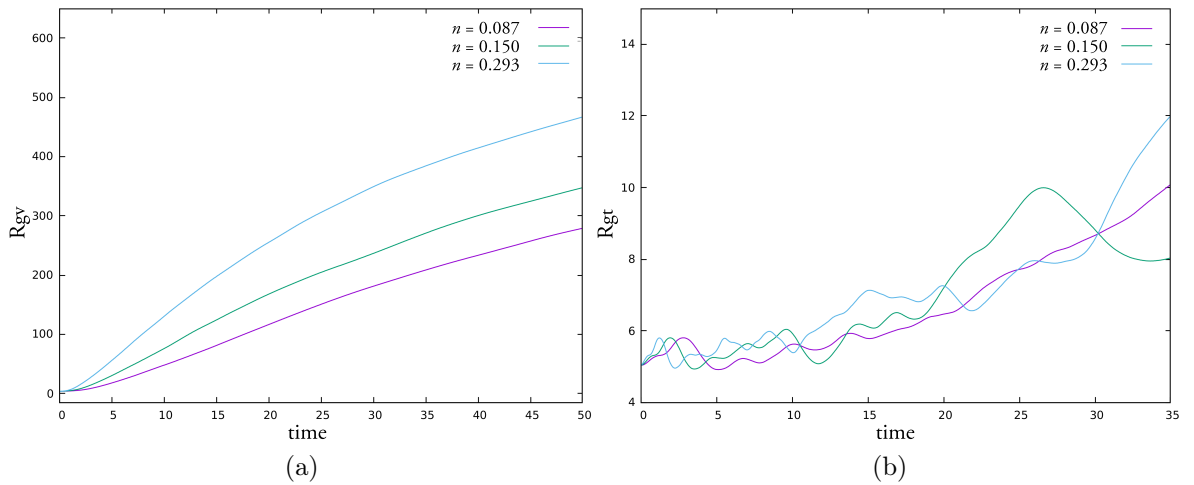


Figura 5: Sono stati graficati il raggio di girazione verticale (a), e quello relativo alla sezione orizzontale (b), entrambi riscalati alle dimensioni iniziali del cluster, per diversi valori di densità iniziale n :

Green $n = 0.150$, Blue $n = 0.293$, Purple $n = 0.087$.

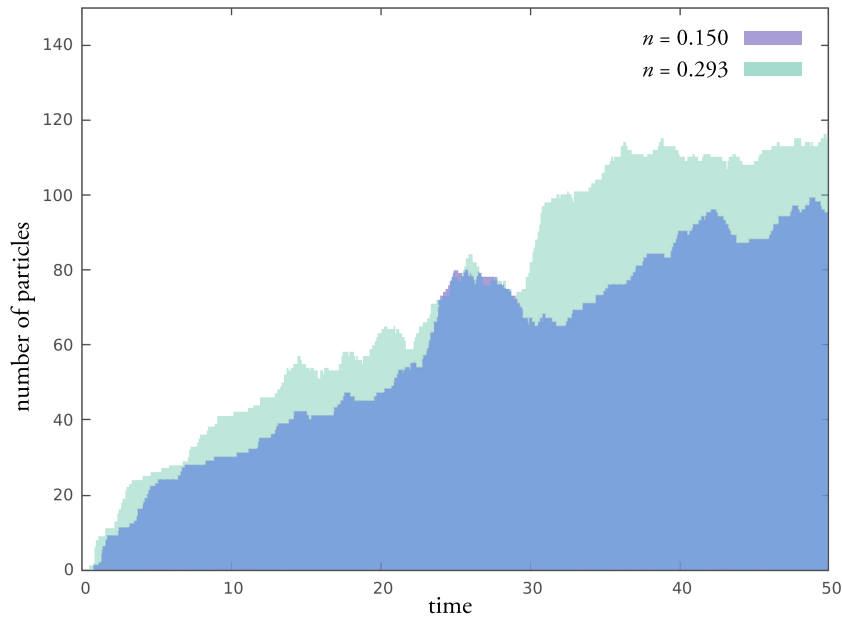
Mentre lungo z il cluster si deforma uniformemente formando la "scia", la deformazione trasversa ha invece un carattere statistico

deformazione nel piano xy che è sempre crescente, ma presenta fluttuazioni nel tempo.

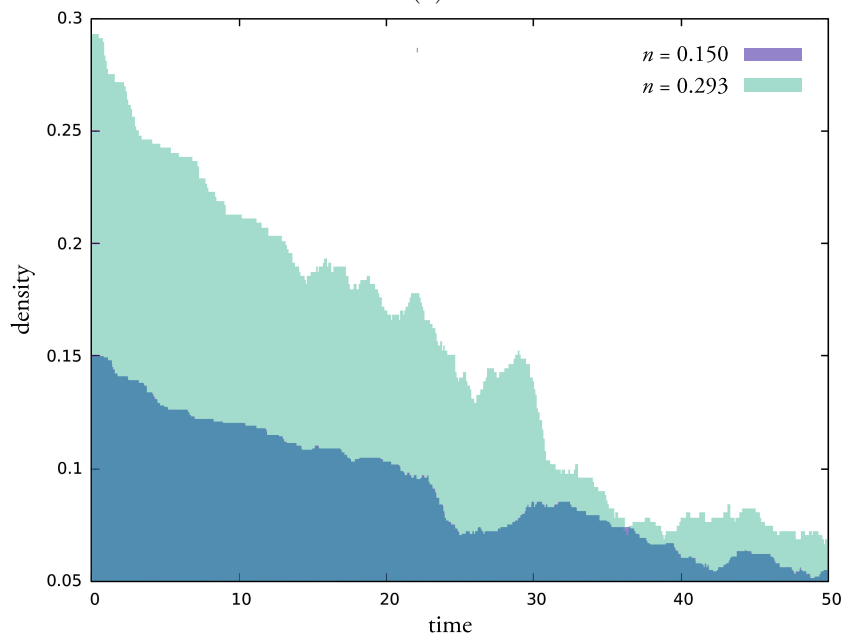
Il raggio di girazione verticale è un buon parametro per la deformazione lungo z del cluster solo nei primi istanti, dopodiché è il contributo della scia a diventare predominante. Il baricentro infatti dopo un certo tempo si sposta rispetto al centro originale del cluster, per questo motivo la quantità più adeguata per descrivere l'evoluzione del cluster è l'*evaporazione*. Questo parametro quantifica le particelle che ancora appartengono al cluster.

L'evaporazione è definita come il numero di particelle esterne ad un cubo avente le dimensioni del cluster originale che ha centro in x e in y del baricentro e che ha come coordinata z della faccia inferiore quella della particella più avanzata ($z_{faccia\ inf} = \min(z_i)$).

Il grafico in Figura 6 mostra in alto il grado di evaporazione in funzione del tempo, mentre in basso la densità n sempre in funzione del tempo. Si nota che dopo 50 tempi di Stokes il cluster che originariamente aveva densità $n = 0.293$ arriva ad avere una densità finale $n = 0.068$, mentre quello con densità iniziale $n = 0.150$ arriva ad avere una densità finale $n = 0.055$. Nell'evoluzione del cluster quindi le densità tendono a diminuire in maniera assoluta e ad uguagliare lo scarto iniziale.



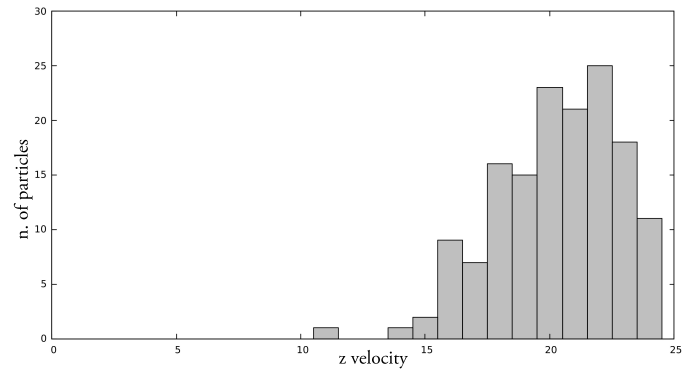
(a)



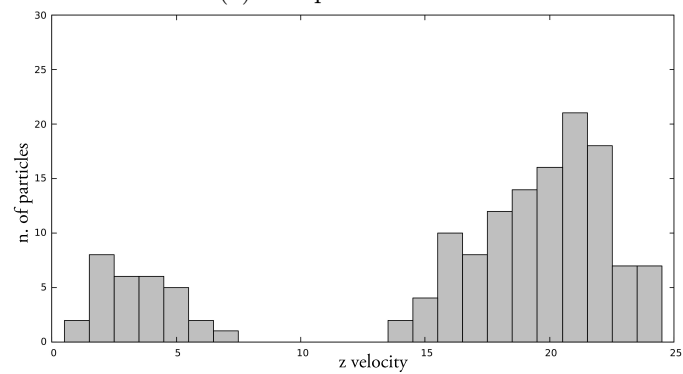
(b)

Figura 6: È stato graficato in alto (a), il numero di particelle che lascia il cluster in funzione del tempo. Questa quantità rappresenta il grado di evaporazione del cluster. Sono stati messi a confronto i valori rispettivi a due densità iniziali differenti:
Purple $n = 0.150$, Green $n = 0.293$.

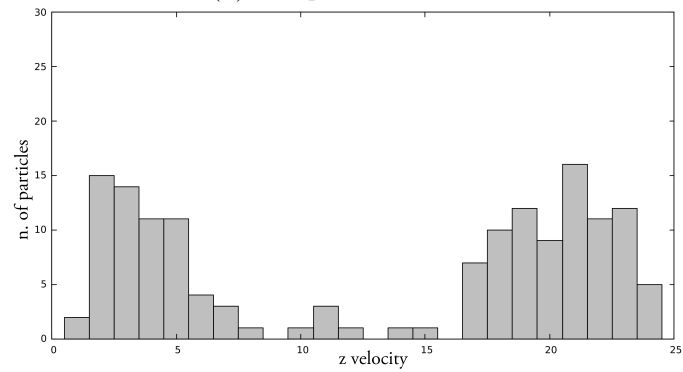
In basso (b) abbiamo invece la densità in funzione del tempo. Dopo 50 tempi di Stokes le densità dei due cluster hanno diminuito il loro scarto.



(a) tempo di Stokes 1



(b) tempo di Stokes 10



(c) tempo di Stokes 40

Figura 7: Sono riportati tre istogrammi a tre tempi diversi tempi di Stokes (1, 10, 40) della simulazione del cluster da 150 particelle con densità iniziale $n = 0.150$. Essi riportano la distribuzione della componente z della velocità in unità naturali del problema.

Sono sufficienti tre istogrammi per notare la distribuzione delle velocità a due picchi, quello sulla destra popolato dalle particelle che appartengono al cluster, quello sulla sinistra invece dalle particelle che rimangono indietro. La distribuzione delle velocità nel tempo passa gradualmente da una configurazione ad un solo picco centrata attorno a 20, ad una finale centrata attorno a 5.

Con che velocità scende il cluster? Si È calcolata la velocità di ogni singola particella per la simulazione con $n = 0.150$ che è riportata in Figura 4. Nei tre istogrammi di Figura 7 abbiamo la distribuzione della componente z delle velocità a tre tempi diversi (1, 10, 40 tempi di Stokes). Nell' asse delle ascisse la velocità è espressa in unità naturali del problema, la velocità di una particella isolata che sedimenta in queste unità ha velocità unitaria. Anche se il numero di particelle non è un campione statistico eccellente, dagli istogrammi si può risalire all'evoluzione generale delle velocità lungo z delle particelle. Inizialmente il cluster procede compatto con un solo picco che si distribuisce attorno a 20. Dopo un certo tempo il picco sulla sinistra centrato su 5 rivela che una parte significativa di particelle (quelle nella coda) ha velocità di molto inferiore a prima, mentre l'altra parte, sempre consistente, appartiene ancora al cluster originale.

Con il tempo tutte le particelle arriveranno ad avere velocità inferiore a 5 e si troveranno distribuite in una lunga "scia". In questo caso il cluster sarà completamente dissolto in una fascia verticale di particelle. Si noti che anche in questo caso le particelle sono più veloci della particella isolata, questo perchè l'interazione idrodinamica è un'interazione a lungo range perciò le particelle sono ancora interagenti pur essendo molto più distanti tra loro rispetto alla configurazione iniziale.

5 Conclusioni

In questa tesi abbiamo studiato l'effetto dell'*interazione idrodinamica* nella sedimentazione di più particelle a partire da casi più semplici, fino alla simulazione di un piccolo cluster di 150 particelle. È stato innanzitutto evidenziato come l'interazione idrodinamica, pur provenendo da un set di equazioni lineari quali le equazioni di Stokes, produca delle equazioni del moto non lineari. Le equazioni del moto infatti, nel caso di più di due particelle, producono una dinamica piuttosto complessa. Questo comportamento è evidente già a partire da un modello, lo Stokeslet, al primo ordine in $\frac{a}{r}$. Sono state inoltre messe in luce delle soluzioni particolari e riconosciuti i pattern caratteristici nella sedimentazione di una particolari geometrie, come il caso simmetrico a quattro particelle o l'esagono con particella centrale. Il primo caso attraverso uno studio delle equazioni differenziali, mentre il secondo esclusivamente tramite simulazione numerica.

Infine ci siamo soffermati sulla deformazione causata dall'interazione idrodinamica ad un cluster di forma cubica. Dallo studio è risultata la presenza di una coda posteriore al cluster durante la sedimentazione. Anche se non prevedibile a priori questa evoluzione è consistente con l'osservazione che le particelle isolate hanno una velocità inferiore piuttosto che in una configurazione più compatta. Perciò nel momento in cui una particella si allontana dal cluster inevitabilmente si trova destinata a staccarsi sempre di più. Inoltre si osserva anche un lento sfaldamento rispetto alla forma iniziale, questo pur non avendo l'interazione carattere repulsivo.

Quali sono i limiti del modello che abbiamo usato per descrivere l'interazione idrodinamica? Lo Stokeslet è il primo ordine di approssimazione del modello basato sul tensore di Oseen. Sarebbe sicuramente proficuo confrontare le simulazioni con un campo di perturbazione all'ordine successivo che tiene conto di termini $\mathcal{O}\left(\frac{1}{r^3}\right)$ [3], ma anche in questo caso non si elude il problema di quando le particelle sono troppo vicine, come accennato nella sezione 4.1. In tali condizioni diventano importanti gli effetti di lubrificazione idrodinamica di cui escludiamo una grande influenza per i casi studiati di tre e quattro particelle. Nel sistema del "mini" cluster invece, è più difficile il controllo della distanza tra le particelle nelle singole interazioni. Perciò questi effetti di certo rientrano nei limiti della trattazione. A tal motivo si è simulato un cluster abbastanza diluito. La lubrificazione idrodinamica agli effetti globali tende a mantenere le particelle più vicine e sopprime perciò lo scattering caotico [7]. È stata trascurata anche la componente dell'interazione idrodinamica proveniente dalla rotazione delle particelle, essa però è $\mathcal{O}\left(\frac{a^3}{r^3}\right)$. Per una sfera in rotazione con velocità angolare $\boldsymbol{\omega}$ infatti il campo di perturbazione di velocità risulta $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \left(\frac{a}{r}\right)^3 \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$ [6].

Come si è puntualizzato nell'introduzione il moto Browniano è un fenomeno presente nella dinamica di particelle colloidali che anzi è fortemente accoppiato con l'idrodinamica della fase disperdente. In questa tesi però si è scelto di concentrare lo studio solo sugli effetti dell'interazione idrodinamica. In una trattazione comunque più generale, che comprende anche le fluttuazioni Browniane nella sedimentazione di sospensioni colloidali, la nostra tesi si collocherebbe nella descrizione della dinamica di tutti quei sistemi in cui il numero di Peclet $P_e \rightarrow \infty$ [9].

A APPENDICI

A.1 Integrale (12)

Risolviamo l'integrale:

$$\begin{aligned} \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \frac{k^2}{k^4} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \cos \theta^2 e^{ikr \cos \theta} = \\ &= \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \int_{-1}^1 d\xi \xi^2 e^{ikr\xi} \end{aligned} \quad (23)$$

Svolgiamo l'ultimo integrale per parti,

$$\begin{aligned} \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \int_{-1}^1 d\xi \xi^2 e^{ikr\xi} &= \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \left[\frac{2 \sin kr}{kr} - \frac{2}{ikr} \int_{-1}^1 d\xi \xi e^{ikr\xi} \right] = \\ &= \frac{i}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \left[\frac{2 \sin kr}{kr} + \frac{4 \cos kr}{(kr)^2} - \frac{2}{(kr)^2} \int_{-1}^1 d\xi e^{ikr\xi} \right] = \\ &= \frac{i}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \int_0^\infty dt \left[\frac{2 \sin t}{t} + \frac{4 \cos t}{(t)^2} - \frac{4 \sin t}{(t)^3} \right] \end{aligned} \quad (24)$$

Ora dati i seguenti integrali,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk \frac{\sin k}{k} &= \frac{\pi}{2} \\ \int_0^\infty dk \frac{1 - \cos k}{k^2} &= \frac{\pi}{2} \\ \int_0^\infty dk \frac{k - \sin k}{k^3} &= \frac{\pi}{4} \end{aligned} \quad (25)$$

Il primo integrale si può facilmente calcolare con il metodo dei residui, e i due successivi dal primo per parti. L'ultimo integrale della (25) si può scrivere,

$$\frac{i}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \int_0^\infty dt \left[\frac{2 \sin t}{t} - 4 \left(\frac{1 - \cos k}{k^2} \right) + 4 \left(\frac{k - \sin k}{k^3} \right) \right] = 0$$

A.2 Costante del moto per tre sfere

Si riportano i conti dell'equazione (19)

$$\begin{aligned}
\frac{d2\Delta}{dt} &= \frac{d\mathbf{r}_{12}}{dt} \times \mathbf{r}_{32} + \mathbf{r}_{12} \times \frac{d\mathbf{r}_{32}}{dt} = \\
&= \left(\frac{1}{r_{31}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{31}^3} \mathbf{r}_{31} - \frac{1}{r_{23}} \mathbf{z} \right) \times \mathbf{r}_{32} + \left(\frac{1}{r_{12}} \mathbf{z} - \frac{1}{r_{31}} \mathbf{z} - \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{31}^3} \mathbf{r}_{31} \right) \times \mathbf{r}_{12} = \\
&= \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{23}}{r_{23}} + \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}} + \left(\frac{1}{r_{31}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{31}^3} \mathbf{r}_{31} \right) \times \mathbf{r}_{32} - \left(\frac{1}{r_{31}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{31}^3} \mathbf{r}_{31} \right) \times \mathbf{r}_{12} = \\
&= \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{23}}{r_{23}} + \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}} + \left(\frac{1}{r_{31}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{31}^3} \mathbf{r}_{31} \right) \times (\mathbf{r}_{32} - \mathbf{r}_{12}) = \\
&= \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{23}}{r_{23}} + \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}} + \left(\frac{1}{r_{31}} \mathbf{z} + \frac{\mathbf{z} \cdot \mathbf{r}_{31}}{r_{31}^3} \mathbf{r}_{31} \right) \times \mathbf{r}_{31} = \\
&= \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{23}}{r_{23}} + \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}} + \mathbf{z} \times \frac{\mathbf{r}_{31}}{r_{31}}
\end{aligned}$$

Bibliography

- [1] Lev D. Landau and E. M. Lifshits, *Fisica Teorica 6. Meccanica dei fluidi*, Editori Riuniti university press, 1958.
- [2] Maciej Lisicki, *Four approaches to hydrodynamic Green's functions - the Oseen tensors*, Poland, 2013.
- [3] I. M. Jànosi, T. Tél, D. E. Wolf, J. A. C. Gallas, *Chaotic particle dynamics in viscous flows: The three-particle Stokeslet problem*, Physical Review E, Vol. 56, No. 3, 2858-2868, 1997.
- [4] L. M. Hocking, *The behaviour of clusters of spheres falling in a viscous fluid Part 2. Slow motion theory*, J. Fluid Mech., 1964, Vol 20, part 2, 129 - 139.
- [5] John Happel, Howard Brenner, *Low Reynolds number hydrodynamics with special applications to particulate media*, Springer, 1981.
- [6] Michael Reichert, *Hydrodynamic Interactions in Colloidal and Biological Systems*, Konstanzer Online-Publikations-System, 2006.
- [7] Maria L. Ekiel-Jezewska, Eligiusz Wajnryb, *Lifetime of a cluster of spheres settling under gravity in Stokes flow*, Physical Review E, Vol. 83, 067301-4, 2011.
- [8] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, England, 1992.
- [9] J. T. Paddling, A. A. Louis, *Hydrodynamic and Brownian Fluctuations in Sedimenting Suspensions*, Physical Review Letters, Vol. 93, 220601-4, 2004.