

# Metoda wyznaczania współczynników transportu ośrodków dyspersyjnych.

Karol Makuch

Instytut Fizyki Teoretycznej  
Uniwersytet Warszawski

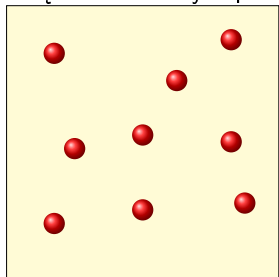
kwiecień 2008

# Plan

- ▶ Ośrodki dyspersyjne, współczynniki transportu (zawiesiny)
- ▶ Motywacja metody - rozwinięcie wirialne
- ▶ Równania ścisłe
- ▶ Przybliżenia
- ▶ Wkład: dwuciałowe oddziaływania i dwuciałowa funkcja korelacji.

# Zawiesiny

Cząstki w zadanym położeniu  $\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N$ .



## Równania Stokesa

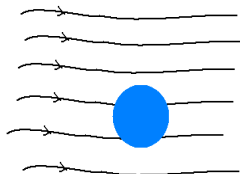
$$-\nabla p + \eta \Delta \vec{v} = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0$$

+ warunki brzegowe

# Jedna cząstka w przepływie zewnętrznym $\vec{v}_0$

Jaka gęstość sił na powierzchni cząstki?



$\vec{v}_0 \implies \vec{f}$  - powierzchniowa gęstość sił

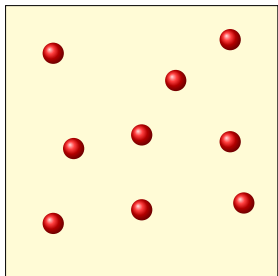
$$\vec{f}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' Z_0(\vec{r} - \vec{r}') \vec{v}_0(\vec{r}')$$

$Z_0$  - jednocząstkowy operator oporu

$$\vec{v}(\vec{r}) = \vec{v}_0(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{f}(\vec{r}')$$

# Zawiesina w przepływie zewnętrznym $\vec{v}_0$

Jaka gęstość sił?



$$f_i = Z_0(i)(v_0 + \sum_{j \neq i} G(ij)f_j)$$

Siła wyraża się przy pomocy szeregu rozproszeniowego:

$$f_i = [Z_0(i) + \sum_{j \neq i} Z_0(i)G(ij)Z_0(j) + \sum_{k \neq i} \sum_{j \neq k} Z_0(i)G(ik)Z_0(k)G(kj)Z_0(j) + \dots] v_0$$

$$f_i = \sum_j T_{ij}(1, \dots, N) v_0$$

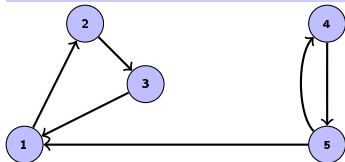
# Uśrednienie po rozkładzie położenia cząstek $p(1, \dots, N)$

Jaka jest średnia gęstość sił  $\langle f(\vec{R}) \rangle$ ?

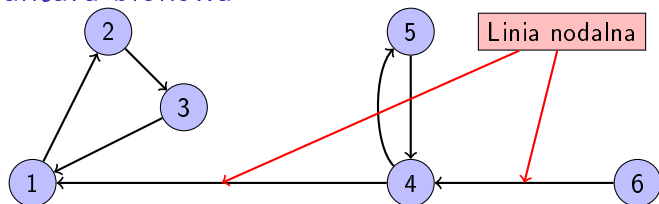
$$\langle f(\vec{R}) \rangle \equiv \left\langle \sum_i f_i \delta(\vec{R}_i - \vec{R}) \right\rangle$$

$$\langle f(\vec{R}) \rangle = \int T(\vec{R} - \vec{R}') v_0(\vec{R}')$$

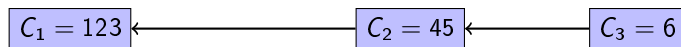
$$T(\vec{R} - \vec{R}') = \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{d=1}^s \int d1 \dots ds T_{1d}(1 \dots s) n(1 \dots s) \delta(1 - \vec{R}) \delta(d - \vec{R}')$$



## Struktura blokowa



Sekwencji rozproszeniowej odpowiada struktura blokowa:



Podzielmy  $T_{1d}(1 \dots s)$  ze względu na strukturę blokową:

$$T_{1d}(1 \dots s) = \sum_{C_1 | \dots | C_b} \tilde{T}_{1d}(C_1 | \dots | C_k)$$

$$T(\vec{R} - \vec{R}') = \sum'_{C_1 | \dots | C_b} \int dC_1 \dots dC_b \tilde{T}_{1d}(C_1 | \dots | C_b) n(C_1 \dots C_b) \delta(1 - \vec{R}) \delta(d - \vec{R}')$$

# Współczynniki transportu

Związek średniej gęstości sił ze średnim polem zawiesiny:

$$\langle f \rangle = X \langle v \rangle \quad \vec{P} = \chi \epsilon_0 \vec{E}$$

$X \implies$  Współczynniki transportu.

Wyznaczenie  $X$ :

$$\langle v \rangle = v_0 + G \langle f \rangle = (1 + GT)v_0$$

$$\langle f \rangle = X \langle v \rangle = X(1 + GT)v_0$$

$$X = T(1 + GT)^{-1}$$



# Operator $X$

$$T(\vec{R} - \vec{R}') = \sum'_{c_1 | \dots | c_b} \int dC_1 \dots dC_b \tilde{T}_{1d}(C_1 | \dots | C_b) n(C_1 \dots C_b) \delta(1 - \vec{R}) \delta(d - \vec{R}')$$

$$X(\vec{R} - \vec{R}') = \sum'_{c_1 | \dots | c_b} \int dC_1 \dots dC_b \tilde{T}_{1d}(C_1 | \dots | C_b) b(C_1 | \dots | C_b) \delta(1 - \vec{R}) \delta(d - \vec{R}')$$

# Blokowa funkcja rozkładu

$$b(C_1) = n(C_1)$$

$$b(C_1 | \dots | C_b) = \begin{cases} \text{wyrazy z rozkładu } n(C_1, \dots, C_b) \text{ na funkcje korelacji,} \\ \text{dla których spełniony jest warunek:} \\ \text{dla każdej linii nodalnej występuje funkcja korelacji} \\ \text{zawierająca cząstki rozdzielone tą linią} \end{cases}$$

Przykładowo dla struktury blokowej: 

$$n(123) = n^3(1 + h(12) + h(13) + h(23) + h(12)h(23) + h(12)h(13) + \dots)$$

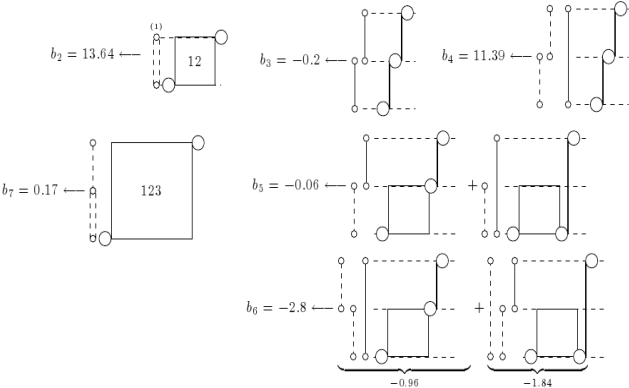
$$h(13), h(12)h(23) \in b(1|2|3)$$

$$h(12) \notin b(1|2|3)$$

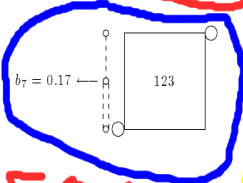
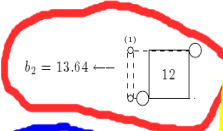
# Rozwinięcie wirialne - współczynnik sedimentacji

$$K = 1 + \lambda\phi + b_c\phi^2 + \dots$$

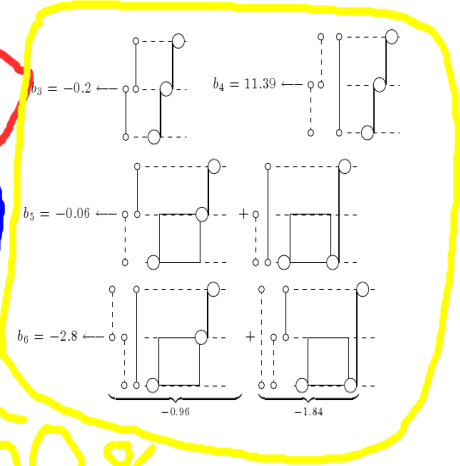
Współczynnik  $b_c$ :



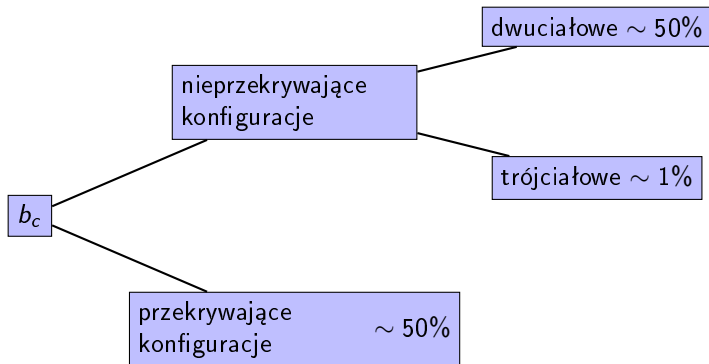
# Rozwinięcie wirialne - współczynnik sedymentacji



~50%  
~1% ~50%



# Motywacja metody



Obserwacja:

Dwuciałowy  $X_{nov}$   
 $G$   
warunek przekrywania }  $\Rightarrow$  Przekrywające konfiguracje trójciałowe

## Związek $X$ z $X_{nov}$

$$X = \sum'_{C_1 | \dots | C_b} \int dC_1 \dots C_b \dots \tilde{T}_{1d}(C_1 | \dots | C_b) b(C_1 | \dots | C_b) \delta(1 - \vec{R}) \delta(d - \vec{R}')$$

$$X_{nov}(A) \equiv \sum_{C_1 | \dots | C_b}^{[A]} \tilde{T}_{1d}(\underbrace{C_1 | \dots | C_b}_A) b(C_1 | \dots | C_b) W(C_1, \dots, C_b)$$

$$W(C_1, \dots, C_k) = \begin{cases} 1 & \text{Brak przekrywania jakichkolwiek cząstek} \\ 0 & \text{W przeciwnym przypadku} \end{cases}$$

$$X = \sum'_{A_1, \dots, A_g} \int dA_1 \dots dA_g \delta(1 - \vec{R}) \delta(d - \vec{R}') \times \\ X_{nov}(A_1) G \dots G X_{nov}(A_g) \bar{b}(A_1 | \dots | A_g)$$

$\bar{b}$ -blokowa funkcja rozkładu dla  $s$ -cząstkowej funkcji rozkładu równej  $W(1 \dots s)$ .

# Blokowa funkcja rozkładu dla przekrywających konfiguracji

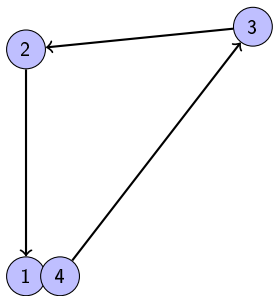
$$F(C_m, C_k) = \begin{cases} 1 & \text{Którakolwiek cząstka z } C_m \text{ przekrywa się z } C_k \\ 0 & \text{W przeciwnym przypadku} \end{cases}$$

Dla więcej niż jednej grupy:

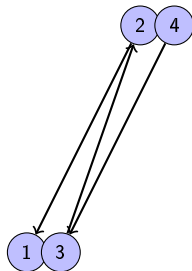
Jeśli żadne cząstki się nie przekrywają  $\implies \bar{b}(C_1 | \dots | C_b) = 0$ ,

$$\bar{b} \sim F + FF + FFF + \dots$$

# Hipoteza o związku objętości całkowania z wkładem diagramu



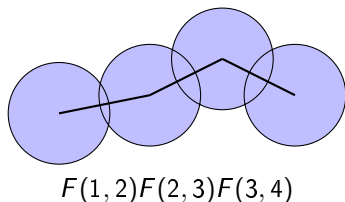
$F(1, 4)$   
Duża objętość całkowania  
- duży wkład



$F(1, 3)F(2, 4)$   
Mała objętość  
całkowania  
- mały wkład



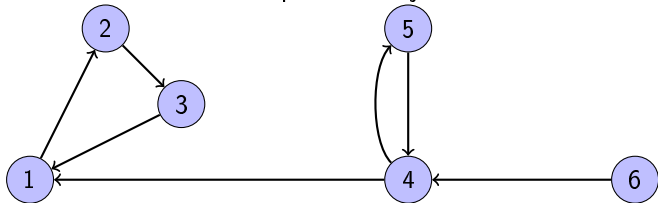
## Konfiguracje przekrywających się cząstek połączonych linią nodalną



Mała objętość całkowania, ale wkład może być duży.

$$X = \sum_{A_1, \dots, A_g} \int dA_1 \dots dA_g \delta(1 - \vec{R}) \delta(d - \vec{R}') \times \\ X_{nov}(A_1) G \dots G X_{nov}(A_g) \bar{b}(A_1 | \dots | A_g)$$

Przykładowo  $g = 3$ ,  $A_1 = \{123\}$ ,  $A_2 = \{45\}$ ,  $A_3 = 6$  dla sekwencji rozproszeniowej:



$$\bar{b}(123|45|6) \underbrace{(W(14) - f(14))}_{=1} = \underbrace{W(14) \bar{b}(123|45|6)}_{G \rightarrow \bar{G} \equiv WG} - \underbrace{f(14) \bar{b}(123|45|6)}_{\text{faktoryzacja}}$$

$$X = \bar{X}(1 - fG\bar{X})^{-1}$$

$$\bar{X} = \sum_{A_1, \dots, A_g} \int dA_1 \dots dA_g \delta(1 - \bar{R}) \delta(d - \bar{R}') \times \\ X_{nov}(A_1) \bar{G} \dots \bar{G} X_{nov}(A_g) \bar{b}(A_1 | \dots | A_g)$$

Przybliżenia:

- ▶  $X_{nov} \approx$  dwuciałowe (analiza rozwinięcia wirialnego)
- ▶  $\bar{b}(A_1 | \dots | A_g) \approx$  wyraz z największą objętością całkowania (hipoteza wkład  $\leftrightarrow$  objętość)

## Wyraz z największą objętością całkowania

W celu wyznaczenia tej części  $\bar{b}$ , która zawiera co najwyżej jeden warunek na przekrywanie się cząstek korzystamy z wyrażenia:

$$F(C_m, C_k) \bar{b}(C_1 | \dots | C_m | \dots | C_k | \dots | C_s) = \\ - \sum_{n=m+1}^k \bar{b}(C_1 | \dots | C_m | \dots | C_{n-1}) \left( \bar{b}(C_n | \dots | C_s) + \right. \\ \left. \sum_{h=n}^{k-1} \bar{b}(C_n \dots C_h) \bar{b}(C_{h+1} | \dots | C_k | \dots | C_s) \right)$$

↓

$$\bar{b}(A_1 | \dots | A_g) \approx -\bar{b}(A_1) W(A_2 \dots A_{g-1}) \bar{b}(A_g) F(A_1, A_g)$$

---

$$\bar{X} = X_{nov} + \\ - \sum_{A_1, \dots, A_g}^I \int dA_1 \dots dA_g \delta(1 - \vec{R}) \delta(d - \vec{R}') \times \\ X_{nov}(A_1) \bar{G} \dots \bar{G} X_{nov}(A_g) \bar{b}(A_1) W(A_2 \dots A_{g-1}) \bar{b}(A_g) F(A_1, A_g)$$

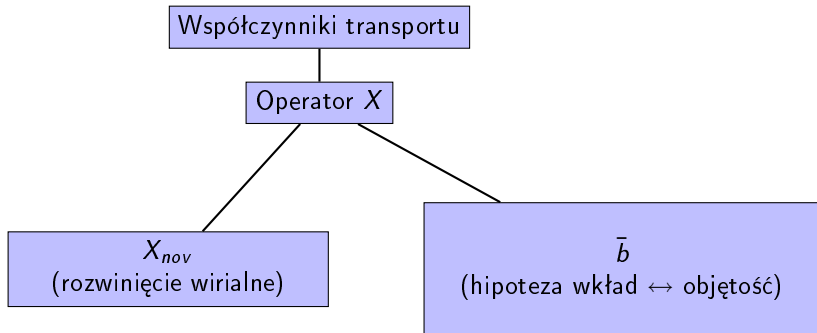
Wyrażenie na  $\bar{X}$  z wykorzystaniem przybliżenia na  $\bar{b}$

$$\bar{X} \approx X_{nov} - \int dA_1 dA_g X_{nov}(A_1) \bar{G}_{eff} X_{nov}(A_g) F(A_1, A_g)$$

$$\bar{G}_{eff} = \bar{G} + \bar{G} T \bar{G}$$

$$T = \bar{X} (1 - \bar{G} \bar{X})^{-1}$$

# Podsumowanie



↓

Zamknięty układ równań na  $X$  przy zadanych:

- ▶ dwuciałowych oddziaływaniach
- ▶ dwuciałowej funkcji korelacji