第 3 章

The effects of hydrodynamics

3.1 Colloidal dispersions

この節では，コロイド分散系における流体力学的相互作用の取扱いについて論じる．分散系において，分散粒子の大きさがコロイド (1 nm∼100 nm) である場合，コロイド分散系と呼ばれる．溶媒の速度場を $\mathbf{v}(\mathbf{r})$，コロイド粒子 n の速度を $\mathbf{V}_n$，コロイド粒子 m が及ぼす力を $\mathbf{F}_m$ とおくと，粒子 n の速度は次式で表される．

$$\mathbf{V}_n = \sum_m \mathbf{H}_{nm} \cdot \mathbf{F}_m \tag{3.1}$$

1. 希薄溶液
   かなり希薄な溶液については，行列 $\mathbf{H}_{nm}$ は次のように表される．
   $$\mathbf{H}_{nm} = \frac{\mathbf{I}\delta_{nm}}{\zeta} \tag{3.2}$$
   すなわち，それぞれのコロイド粒子は独立に運動し，流体の影響のみを受けることになる．
   $$V_n^\alpha = \frac{F_n^\alpha}{\zeta} \tag{3.3}$$
   ここで，$\mathbf{I}$ は単位行列を表し，δ_{nm} はクロネッカーのデルタである．
2. Oseen tensor
   コロイド粒子の濃度が希薄でない場合は，それぞれの粒子が他の粒子からの影響を受けることになる．簡単のため，粒子の回転を考慮しないとすると，スリップなしの条件下では，粒子の位置における流体の速度場と粒子の速度は一致しなければならない．すなわち，
   $$\mathbf{V}_n = \mathbf{v}(\mathbf{R}_n) \tag{3.4}$$
   が成り立つ．ここで，流体にはたらく外力 $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ が粒子によるもののみであるとすると，次の式で表される．
   $$\mathbf{g}(\mathbf{r}) = \sum_n \mathbf{F}_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \tag{3.5}$$

さて，流体が非圧縮条件を満たすとすると式 (3.6)，(3.7) が成り立つ．

$$
\begin{cases}
\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{連続の式}) & (3.6) \\
\eta \boldsymbol{\nabla}^2 \mathbf{v}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\nabla} P = -\mathbf{g}(\mathbf{r}) \quad (\text{Navier} - \text{Stokes 式}) & (3.7)
\end{cases}
$$

ここで η，P はそれぞれ，流体の粘度と圧力を表している．$\mathbf{v}$ に対するフーリエ変換 $\mathbf{v_k}$ を式 (3.8) と定義して，式 (3.6)，式 (3.7) をフーリエ変換すると式 (3.9)，(3.10) が得られる．

$$
\mathbf{v_k} \equiv \frac{1}{V} \int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \mathbf{v}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \tag{3.8}
$$

$$
\begin{cases}
\mathbf{k} \cdot \mathbf{v_k} = 0 & (3.9) \\
-\eta k^2 \mathbf{v_k} - i\mathbf{k}\mathbf{P_k} = -\mathbf{g_k} & (3.10)
\end{cases}
$$

式 (3.10) の両辺に $\mathbf{k}$ の内積をとったものを式 (3.9) に代入すると，

$$
-\eta k^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{v_k} - ik^2 P_{\mathbf{k}} = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{g_k} \tag{3.11}
$$

が得られる．ここで，

$$
P_{\mathbf{k}} = -\frac{i}{k^2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{g_k} \tag{3.12}
$$

である．式 (3.12) を式 (3.10) に代入すると．

$$
\begin{aligned}
-\eta k^2 \mathbf{v_k} - i\mathbf{k} \frac{-i\mathbf{k}}{k^2} \cdot \mathbf{g_k} &= -\mathbf{g_k} \\
\mathbf{v_k} &= \frac{1}{\eta k^2} \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{kk}}{k^2} \right) \cdot \mathbf{g_k} \\
&= \mathbf{H_k} \cdot \mathbf{g_k}
\end{aligned} \tag{3.13}
$$

上式を逆フーリエ変換すると $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ を得る式と，Oseen tenosr を得る．

$$
\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\mathbf{r}' \mathbf{H}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{g}(\mathbf{r}') \tag{3.14}
$$

Oseen tensor

$$
\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta r} \left(\mathbf{I} + \frac{\mathbf{rr}}{r^2} \right) \tag{3.15}
$$

式 (3.14) を離散化すると，

$$
\begin{aligned}
\mathbf{V}_m &= \mathbf{v}(\mathbf{R}_m) \\
&= \int \mathrm{d}\mathbf{r}'\ \mathbf{H}(\mathbf{R}_m - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{g}(\mathbf{r}')
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \int \mathrm{d}\mathbf{r}' \; \mathbf{H}(\mathbf{R}_m - \mathbf{r}') \cdot \sum_m \mathbf{F}_m \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m) \\
&= \sum_m \mathbf{H}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) \cdot \mathbf{F}_m \\
&= \sum_m \mathbf{H}_{nm} \cdot \mathbf{F}_m
\end{aligned}
\tag{3.16}
$$

である．Oseen tensor は，そのままでは $r=0$ すなわち，$\mathbf{H}_{nn}$ で発散してしまうため，

$$
\mathbf{H}_{nm} = \begin{cases} \frac{\mathbf{I}}{\zeta} & n = m \\ \frac{1}{8\pi\eta r}\left(\mathbf{I} + \frac{\mathbf{rr}}{r^2}\right) & n \neq m \end{cases}
\tag{3.17}
$$

とすることが多い．一方で，Oseen tensor を用いることによる問題点もある．

(a) 粒子の大きさを考えるのが困難

(b) 粒子同士の距離が近い場合は使えない

このような問題に対処するためには，まともに Navier-Stokes 方程式を解く必要がある．

3.2 Summary for hydrodynamic interactions (HI) between particles

3.2.1 移動度テンソル (Mobility tensor)

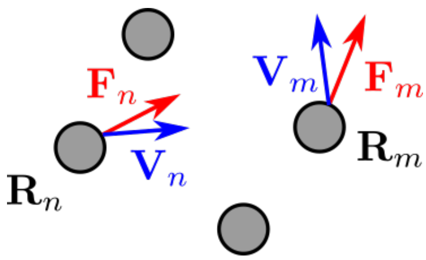


図 3.1

半径 a の球形粒子 N 個が，粘度 η の非圧縮性流体中に浮遊している状況を考えてみよう．それぞれの粒子位置ベクトルを $\mathbf{R}_1$，$\mathbf{R}_2$，$\cdots, \mathbf{R}_N$，粒子にはたらく力を $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \cdots, \mathbf{R}_N$ とおく．ここで，粒子には外部からのトルクが働かずまた，レイノルズ数 Re が非常に小さいため慣性力は無視できると仮定する．このとき，粒子の速度は移動度テンソル $\mathbf{H}_{nm}$ を用いて以下の式で記述できる．

$$
\mathbf{V}_n = \frac{\mathrm{d}\mathbf{R}_n}{\mathrm{d}t} = \sum_{m=1}^{N} \mathbf{H}_{nm} \cdot \mathbf{F}_m
\tag{3.18}
$$

移動度テンソル $\mathbf{H}_{nm}$ の近似法は，そのレベルに応じて以下の 3 つに集約できる．

1. No HI:

$$\mathbf{H}_{nn} = \frac{1}{6\pi\eta a}\mathbf{I} \tag{3.19}$$

$$\mathbf{H}_{nm} = 0 \quad (n \neq m) \tag{3.20}$$

2. Oseen tensor:

$$\mathbf{H}_{nn} = \frac{1}{6\pi\eta a}\mathbf{I} \tag{3.21}$$

$$\mathbf{H}_{nm} = \frac{1}{8\pi\eta r}\left[\mathbf{I} + \frac{\mathbf{rr}}{r^2}\right] \quad (n \neq m) \tag{3.22}$$

3. Rotne-Prager-Yamakawa (RPY) tensor:

$$\mathbf{H}_{nn} = \frac{1}{6\pi\eta a}\mathbf{I}\mathbf{H}_{nm} = \frac{1}{8\pi\eta a}\left[\mathbf{I} + \frac{\mathbf{rr}}{r^2} + \frac{2}{3}\left(\frac{a}{r}\right)^2\left(\mathbf{I} - \frac{3\mathbf{rr}}{r^2}\right)\right] \quad (n \neq m) \tag{3.23}$$

ここで,

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m, \quad r = |\mathbf{r}| \tag{3.24}$$

である.

3.2.2 Quiz

1. squeeze

$$\begin{cases} \mathbf{V}_1 = \mathbf{H}_{11} \cdot \mathbf{F}_1 + \mathbf{H}_{12} \cdot \mathbf{F}_2 \\ \mathbf{V}_2 = \mathbf{H}_{22} \cdot \mathbf{F}_2 + \mathbf{H}_{21} \cdot \mathbf{F}_1 \end{cases} \tag{3.25}$$

- Oseen

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{6\pi\eta a}F + \frac{1}{8\pi\eta r}[1+1](-F) \\ &= \left[\frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{4\pi\eta r}\right]F \end{aligned} \tag{3.26}$$

$$\frac{V}{F} = \frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{4\pi\eta r} \tag{3.27}$$

- RPY

$$\frac{V}{F} = \frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{4\pi\eta r} + \frac{1}{6\pi\eta r}\left(\frac{a}{r}\right)^2 \tag{3.28}$$

2. tangential

- Oseen

$$V = \frac{1}{6\pi\eta a}F + \frac{1}{8\pi\eta r}[1+0](-F)$$

$$= \left[\frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{8\pi\eta r} \right] F \tag{3.29}$$

$$\frac{V}{F} = \frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{8\pi\eta r} \tag{3.30}$$

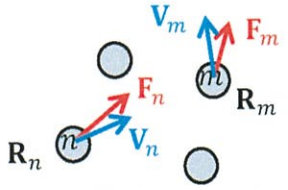
- RPY

$$\frac{V}{F} = \frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{8\pi\eta r} + \frac{1}{12\pi\eta r} \left(\frac{a}{r} \right)^2 \tag{3.31}$$

3. Summary for hydrodynamic interactions (HI) between particles

Ryoichi Yamamoto

1. Mobility tensor



Suppose that a collection of N spherical particles, all having the same radius a, are suspended in an incompressible fluid with the viscosity η. Let $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \cdots, \mathbf{R}_N$ be the positions of the particles and $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \cdots, \mathbf{F}_N$ be the force acting on them. We assume that there are no external torques acting on the particles and inertia effects are all neglected due to very small Re. Then the velocities of the particles are written as

$$\mathbf{V}_n = \frac{d\mathbf{R}_n}{dt} = \sum_{m=1}^{N} \mathbf{H}_{nm} \cdot \mathbf{F}_m$$

by using the mobility tensor $\mathbf{H}_{nm}$. Three representations of $\mathbf{H}_{nm}$ with different levels of approximations are summarized below.

I) No HI:

$$\mathbf{H}_{nn} = \frac{1}{6\pi\eta a}\mathbf{I}$$
$$\mathbf{H}_{nm} = 0 \qquad (n \neq m)$$

II) Oseen tensor:

$$\mathbf{H}_{nn} = \frac{1}{6\pi\eta a}\mathbf{I}$$
$$\mathbf{H}_{nm} = \frac{1}{8\pi\eta r}\left[\mathbf{I} + \frac{\mathbf{rr}}{r^2}\right] \qquad (n \neq m)$$

III) Rotne-Prager-Yamakawa (RPY) tensor:

$$\mathbf{H}_{nn} = \frac{1}{6\pi\eta a}\mathbf{I}$$
$$\mathbf{H}_{nm} = \frac{1}{8\pi\eta r}\left[\mathbf{I} + \frac{\mathbf{rr}}{r^2} + \frac{2}{3}\left(\frac{a}{r}\right)^2\left(\mathbf{I} - \frac{3\mathbf{rr}}{r^2}\right)\right] \qquad (n \neq m)$$

Here,

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m, \quad r = |\mathbf{r}|$$

$$\boxed{\mathbb{V}_n = \sum_m \mathbb{H}_{nm} \cdot \mathbb{F}_m}$$

Oseen tensor

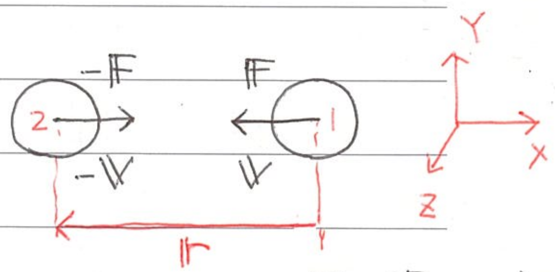
$$\begin{cases} \mathbb{H}_{nn} = \dfrac{\mathbb{I}}{6\pi\eta a} \\ \mathbb{H}_{nm} = \dfrac{1}{8\pi\eta r}\left[\mathbb{I} + \dfrac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2}\right] \quad n \neq m \end{cases} \qquad \mathbf{r} = \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n$$

RPY tensor

$$\begin{cases} \mathbb{H}_{nn} = \dfrac{\mathbb{I}}{6\pi\eta a} \\ \mathbb{H}_{nm} = \dfrac{1}{8\pi\eta r}\left[\mathbb{I} + \dfrac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} + \dfrac{2}{3}\left(\dfrac{a}{r}\right)^2\left(\mathbb{I} - \dfrac{3\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2}\right)\right] \end{cases}$$

Quiz

i) squeeze



$$\begin{cases} \mathbb{V}_1 = \mathbb{H}_{11} \cdot \mathbb{F}_1 + \mathbb{H}_{12} \cdot \mathbb{F}_2 \\ \mathbb{V}_2 = \mathbb{H}_{22} \cdot \mathbb{F}_2 + \mathbb{H}_{21} \cdot \mathbb{F}_1 \end{cases}$$

$\mathbb{F} = (F, 0, 0)$
$\mathbb{V} = (V, 0, 0)$
$\mathbf{r} = (r, 0, 0)$

Oseen

$$V = \frac{1}{6\pi\eta a}F + \frac{1}{8\pi\eta r}[1+1](-F)$$

$$= \left[\frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{4\pi\eta r}\right]F$$

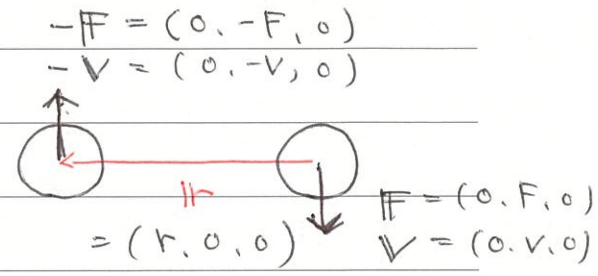
$$\frac{V}{F} = \frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{4\pi\eta r}$$

年 月 日

RPY.

$$\frac{V}{F} = \frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{4\pi\eta r} + \frac{1}{6\pi\eta r}\left(\frac{a}{r}\right)^2$$

ii) tangential.



Oseen

$$V = \frac{1}{6\pi\eta a} F + \frac{1}{8\pi\eta r}[1 + 0](-F)$$

$$= \left[\frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{8\pi\eta r}\right] F$$

$$\frac{V}{F} = \frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{8\pi\eta r}$$

RPY.

$$\frac{V}{F} = \frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{8\pi\eta r} - \frac{1}{12\pi\eta r}\left(\frac{a}{r}\right)^2$$