



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

SEDIMENTACIÓN Y FLUCTUACIONES EN SUSPENSIONES CONFINADAS

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER
EN CIENCIAS, MENCIÓN FÍSICA

FRANCISCO CAMILO MENA GONZÁLEZ

PROFESOR GUÍA
RODRIGO SOTO BERTRÁN

MIEMBROS DE LA COMISIÓN EVALUADORA
PATRICIO CORDERO SIMUNOVIC
RODRIGO HERNÁNDEZ PELLICER
VÍCTOR MUÑOZ GÁLVEZ

SANTIAGO DE CHILE
JULIO 2007

Dedico la presente tesis a mi buen amigo George Benner, sin el cual mi vida sería radicalmente distinta.
Gracias por indicarme cuál es el primer paso que lleva a la verdad.

“Entusiastas son los embajadores de Dios”
Dr. Pascal Beverly Randolph

“¡Si la vida es mágica...!”
Prof. Segio Hojman

“A child of five would understand this. Send someone to fetch a child of five.”
Groucho Marx¹, en *Sopa de Ganso*.

¹Esta frase la leí en la tesis del Dr. Brian J. Zadler, y decidí agregarla a mi tesis también.

Resumen

En el presente trabajo se estudia la dinámica de suspensiones en un sistema cuasi bidimensional (celda de Hele-Shaw), considerando partículas no Brownianas inmersas en un fluido viscoso confinado entre dos paredes infinitas, paralelas al plano en que se mueven las partículas. Al desplazarse una partícula, ésta provoca una perturbación en el fluido, el cual la transmite a lo largo del sistema y, por lo tanto, afecta a las demás partículas presentes.

El objetivo principal es obtener un modelo que permita describir las interacciones de campo lejano entre las partículas, continuando la investigación que realizó la Dra. Álvarez en su tesis doctoral [1]. La aproximación del modelo dipolar desarrollada por la Dra. Álvarez se extiende a un modelo cuadrupolar; en otras palabras, se analizó el siguiente término en la serie de Fourier. Se recuperan los resultados de la Dra. Álvarez en relación a la fuerza hidrodinámica entre las partículas; específicamente, el lento decaimiento (que va como el cuadrado del inverso de la distancia, R^{-2}) y el fenómeno de “antiarrastre” entre partículas. En la expresión de esta fuerza queda de manifiesto la interacción entre todas las partículas del sistema, además del efecto que la misma partícula produce sobre sí misma al desplazarse.

Se procede a analizar el caso particular de la sedimentación, i.e., el efecto de considerar la fuerza de gravedad. Se calcula la velocidad terminal de sedimentación, como también sus fluctuaciones (i.e., la desviación estándar). Para ello se utilizan tanto el modelo dipolar como el cuadrupolar, lo cual permite comparar ambos modelos; se concluye que las correcciones del modelo cuadrupolar no son despreciables si se desea precisión, pero de todas maneras el modelo dipolar logra rescatar la dinámica principal del sistema.

Para realizar los cálculos utilizando un modelo consistente que no presente problemas de convergencia, se incorpora la presencia de paredes perpendiculares al plano en que se mueven las partículas mediante el método de imágenes. Una importante conclusión obtenida es que tanto la velocidad de sedimentación como sus fluctuaciones son independientes de tanto el tamaño como la geometría del sistema, a diferencia del caso tridimensional, en donde estudios indican que la geometría del sistema determina el comportamiento de las fluctuaciones.

Finalmente, se desarrolla un modelo a partir de la Mecánica Estadística para calcular la función distribución de pares de partículas $g^{(2)}$ y se obtiene la jerarquía YBG correspondiente a este sistema. Considerando el régimen de una suspensión muy diluida se logra calcular una expresión analítica para $g^{(2)}$, la cual presenta en su forma el hecho de que la fuerza de campo lejano tiende a producir un déficit en el número de partículas cerca de una partícula de prueba. La nueva expresión para $g^{(2)}$ es empleada para calcular un nuevo valor de la velocidad terminal de sedimentación.

Agradecimientos

¡**Muchísimas gracias!** a todos aquellos que he conocido en mi vida. Suena demasiado amplio, pero de una u otra manera influyeron en el camino que me ha llevado hasta aquí.

Ahora en particular a la tesis, quisiera agradecer a mis compañeros de oficina: Fernando Aguayo, quien siempre me apoyó en momentos que la veía negra entre las clases auxiliares, las postulaciones a la beca Fulbright-Conicyt y la tesis; Juan Sebastián González, quien hizo muy divertido el trabajo diario; Natalia Rodríguez, quien estuvo muy atenta a mi bienestar y divirtió mucho con su compañía; y claro están también Pablo Gutiérrez y Jaime Zúñiga. También están todos los profesores del departamento, cuya dedicación en nuestra educación agradezco profundamente; en particular, al profesor Cordero, Dino Risso y Jarosław Piasecki, con quienes fue muy grato trabajar; Nicolás Mujica, Marcel Clerc, Fernando Lund y René Mendez, todos muy dispuestos a ayudarme, muchas gracias.

No puedo dejar de mencionar a mi familia, quien mostró atento interés en mi trabajo y estudios (a pesar de que claramente les parecían chino-mandarín); a mi padre, por financiar mis estudios y consentir mi elección en física, y mi madre, por siempre incentivarme a ser mejor e independiente; a mis hermanos, quienes con su peculiar forma de ser sazonaron mi vida y le dieron más sabor. Mi hermana Nadia, siempre amable conmigo e incentivando mis proyectos; mi hermano Nicolás, generoso y dispuesto a ayudarme. A mis amigos en E.E.U.U, Rev. George Benner, Dr. William Kracht, Terry Kracht, Miriam y Ricardo Galaz.

A todos mis amigos de licenciatura, algunos en Calán, otro en Inglaterra; a mis amigos de Polonia, quienes hicieron de mi estadía algo fenomenal; al CIMAT, por las experiencias que me permitió vivir y buenos amigos conocer en sus congresos; a mis alumnos como profesor auxiliar, y a mis amigos de Oikos. Todos ellos han hecho de mi pasar por el departamento de física una experiencia espectacular e inolvidable.

Y obviamente a mi profesor guía Rodrigo Soto, sin quien nada de nada hubiera sucedido. Gracias a él tomé un avión y conocí territorio no chileno por primera vez, y además su infinita paciencia me permitió postular a la beca Fulbright-Conicyt en forma paralela a mis estudios de Magíster. No sólo estuvo presente para guiarme en la tesis, sino que también en las banalidades, complejas para mí, como es la computación. Entiendo porqué mi predecesora, Alejandra Álvarez, agradeció al profesor Soto “por todas las veces que debió patearme y no lo hizo”; comparto el mismo sentimiento, gracias, profe.

Índice general

1. Introducción	1
2. La expansión cuadrupolar	10
2.1. Sistema	10
2.2. Expansión cuadrupolar	14
2.3. Deducción de la dinámica	27
2.3.1. Fuerzas	30
2.3.2. Redefiniciones	35
2.4. Aplicación del modelo	36
3. Imágenes	38
3.1. Método de Imágenes	38
4. Velocidad terminal	48
4.1. Ecuaciones de base	48
4.1.1. Caso dipolar	49
4.1.2. Caso cuadrupolar	62
5. Las fluctuaciones de velocidad	68
5.1. La desviación estándar de la Velocidad	68
5.1.1. Mediante el modelo dipolar	69
5.2. Desviación estándar por componentes	78
5.2.1. Cálculo de $\sigma(U_x)$	78
5.2.2. Cálculo de $\sigma(U_y)$	81
5.3. Modelo cuadrupolar	82
5.3.1. Cálculo de $\sigma(U_x)$	82
5.3.2. Cálculo de $\sigma(U_y)$	83
5.4. Resumen de resultados	85
5.5. Una interesante observación	85
6. Cálculo de la función correlación de pares	88
6.1. Ecuación de evolución del sistema	88
6.1.1. Cálculo de la solución	93
7. Conclusiones	102
7.1. Temas por desarrollar	103
A. Relaciones entre tensores	106

B. Cálculo de $\sigma(U_y)$ usando el modelo dipolar	107
C. Posters	111

Índice de figuras

2.1.	Sistema bidimensional con esferas como partículas.	11
2.2.	Sistema que se utilizará, considerando discos para las partículas.	11
2.3.	Diversos vectores involucrados en los cálculos. \vec{R}_i apunta al centro de la partícula i y \vec{r}_i a un punto de su superficie. \hat{n}_i es el vector normal a la superficie de la partícula, con origen en el punto \vec{r}_i ; de esta manera se puede definir el ángulo ϕ_i entre cierto eje fijo y \hat{n}_i . La arbitrariedad en elegir este eje no influye pues en las fórmulas (2.21) y (2.22) se integra entre 0 y 2π	15
2.4.	Nuevos vectores definidos. \vec{R}_{ik} apunta desde el centro de la partícula k hacia el centro de la partícula i . \vec{n}_i tiene origen en el centro de la partícula i y apunta a su superficie, paralelo a \hat{n}_i . Se eligió el eje \hat{x} (que define al ángulo ϕ de cada partícula) paralelo a \vec{U}_i , el vector velocidad de la partícula i . \vec{D}_{ik} apunta desde el centro de la partícula i hacia el vector \vec{n}_k . El ángulo ψ_{ik} es el ángulo entre \hat{x} y \vec{D}_{ik}	16
2.5.	Diferencia entre los casos $k \neq i$ y $k = i$. Figura de la izquierda: caso $k \neq i$. Figura de la derecha: caso $k = i$, en la que, por claridad, se han redefinido ciertas cantidades involucradas en los cálculos.	25
2.6.	Se recuerdan los vectores involucrados en los cálculos. \vec{R}_k apunta hacia el centro de la partícula k , \vec{r}_k a su superficie y \vec{n}_k va desde \vec{R}_k hasta \vec{r}_k . ϕ_k es el ángulo entre el eje \hat{x} y \vec{n}_k	28
2.7.	El nuevo vector introducido en el cálculo \vec{b}_k apunta desde el centro de la partícula k hacia el punto \vec{r} en donde se desea evaluar la presión. γ_k es el ángulo entre \hat{x} y \vec{b}_k	28
2.8.	Representación esquemática de los lóbulos de presión generados por un campo dipolar (izquierda) y cuadrupolar (derecha). En las zonas con un signo '+' hay una mayor presión, mientras que en donde hay un '-' hay menor presión.	29
2.9.	Para facilitar la interpretación del resultado (2.78), este dibujo representa en forma esquemática los campos de velocidad que generan un campo dipolar (figura izquierda) y un campo cuadrupolar (figura derecha). Notar que son consistentes con los lóbulos de presión.	30
3.1.	Una carga q cerca de un plano conductor (izquierda) y el problema equivalente de la misma carga q junto con su carga imagen $-q$ (derecha).	39
3.2.	Una partícula cerca de dos paredes y las imágenes asociadas a ella. La partícula puede desplazarse en el plano XY	39
3.3.	Los vectores dipolares para la partícula de prueba y sus imágenes. Notar que es similar a las reflexiones en un espejo.	41
3.4.	Configuración para el cálculo del aporte asociado a las imágenes propias.	42
3.5.	Configuración para el cálculo del aporte asociado al efecto de las imágenes asociadas a la partícula k sobre la partícula i	43

- 3.6. Sistema bidimensional con una pared lateral y un fondo. Se distingue la región cercana a las paredes Ω_1 (color claro) de aquella lejana a las paredes Ω_2 (color oscuro). 47
- 6.1. Función distribución de pares obtenida en el límite de una suspensión infinitamente diluida (ecuación (6.39), línea continua), en comparación con la aproximación de considerar sólo el volumen excluido utilizada anteriormente (ecuación (4.58), puntos). 100

Capítulo 1

Introducción

El presente trabajo consiste en un estudio teórico de suspensiones. Una suspensión es una combinación física o mezcla de dos o más sustancias, una sólida finamente dividida y dispersada en la otra, un fluido. Una mezcla se diferencia de un compuesto en el sentido de que este último es una combinación química de dos o más sustancias. Por ejemplo, arena en agua, polvo en el aire y gotas de aceite en el aire son suspensiones; el hidróxido de sodio (soda cáustica) $NaOH$ es un compuesto que se forma por la reacción química entre el sodio metal y el agua [12].

Las mezclas se clasifican generalmente como homogéneas o heterogéneas; las soluciones y coloides son mezclas homogéneas, en que sus componentes están tan combinadas que no son observables a simple vista. Una suspensión es una mezcla heterogénea en la que el componente sólido es lo suficientemente grueso como para ser distinguido mediante observación (aunque algunas requieren de un microscopio para esto).

En realidad no hay una separación muy precisa entre los tamaños que deben tener las partículas para que la mezcla sea considerada una solución, coloide o suspensión, pero es suficiente para distinguir entre estos sistemas. Las partículas en una solución son de tamaño molecular o menor; las partículas sólidas son del mismo tamaño que las partículas de la fase fluida (en la actualidad se pueden ver con un microscopio de fuerza atómica) y no sedimentan (*i.e.*, no precipitan hacia el fondo del contenedor bajo el efecto de la gravedad) si se las deja libres. En los coloides, las partículas son de mayor tamaño que el molecular pero no lo suficiente como para ser observadas directamente con un microscopio; para ello se puede usar un microscopio electrónico. Finalmente, son típicamente del orden de 1 a 1000 nanómetros (1 nanómetro = 10^{-9} metros). Las partículas en una suspensión son más grandes que las de los coloides y las soluciones, y sedimentan si la suspensión no se perturba.

Al considerar el caso de partículas en un coloide, las moléculas del fluido están incesantemente interactuando con las partículas del sólido mediante colisiones; este continuo bombardeo sobre la partícula provoca fluctuaciones en su posición, las cuales son conocidas como fluctuaciones térmicas. Las colisiones impulsan a la partícula en direcciones arbitrarias, pues las moléculas del fluido chocan con la partícula en cualquier parte de su superficie con igual probabilidad. Este movimiento azaroso de la partícula es conocido como “movimiento Browniano”. La distancia media recorrida por la partícula es finita pero en promedio su desplazamiento es nulo.

En el caso de una suspensión que yace en un plano vertical, la física es un tanto más compleja, pues las partículas pueden sedimentar. Si la suspensión está confinada a moverse en un plano, entonces si dicho plano es horizontal no hay una dirección privilegiada, mientras que en el caso en que el plano es puesto vertical claramente hay una dada por la fuerza de gravedad.

Otro fenómeno fundamental a tomar en cuenta, además del movimiento Browniano, es la in-

teracción hidrodinámica entre las partículas. “Hidrodinámica” en el sentido de que las partículas interactúan entre ellas a través del fluido — cuando una partícula se mueve desplaza el fluido alrededor de ella, provocando un flujo; este flujo afecta la dinámica de, tanto la misma partícula que lo provocó, como de las demás partículas en el sistema. Estas interacciones se caracterizan por ser de largo alcance (*i.e.*, decaen lentamente con la distancia), por lo que, aunque dos partículas estén lejanas una de otra, el efecto de una sobre otra no se puede despreciar *a priori*. Por lo tanto, el problema a tratar es uno de múltiples partículas interactuantes [10].

Una suspensión sedimentante es un sistema fuera del equilibrio debido a que los mecanismos de inyección y disipación de energía son distintos; por un lado, la gravedad inyecta energía, mientras que el roce viscoso la disipa. Estos dos fenómenos en conjunto no permiten que el sistema alcance un estado de equilibrio. Sin embargo, tanto en estudios teóricos como experimentales se supone la existencia de un estado estacionario¹ en el cual la dependencia temporal ha desaparecido del sistema y es posible calcular promedios estadísticos de las propiedades estudiadas que son independientes del tiempo; sin embargo, este estado puede no ser simple de obtener [35].

Como se puede ver, a pesar de que las suspensiones son sistemas muy simples — un fluido al cual se le agregan partículas — la gama de fenómenos que aparecen es muy rica y no del todo entendidos. Las suspensiones son muy habituales, apareciendo en diversas ciencias y en distintas aplicaciones. Por ejemplo, se pueden mencionar la eliminación de contaminantes en agua, la deposición del cieno en ríos, el polvo en el aire, la centrifugación de proteínas y las células en la sangre; en la industria la sedimentación es un antiguo proceso utilizado para separar partículas de distintas densidades o tamaños. Como se puede apreciar entonces, un mayor entendimiento de las suspensiones sería bastante beneficioso. Esta tesis tiene como objetivo, por lo tanto, ayudar al entendimiento de las suspensiones.

El sistema estudiado en esta tesis consiste en una suspensión cuasi-bidimensional, *i.e.*, las partículas se mueven en un plano confinadas entre dos paredes. Esta configuración se presenta tanto en importantes aplicaciones prácticas como en la vida diaria (*e.g.*, microfluídica y sistemas biológicos); además presenta interés científico, pues la física de las suspensiones en dos dimensiones difiere de aquella en tres dimensiones, apareciendo nuevos e interesantes fenómenos [13].

En este trabajo se consideran suspensiones de partículas polidispersas (*i.e.*, partículas de diversos radios) con inercia suficientemente grande como para poder despreciar el movimiento browniano (*partículas no brownianas*), y de densidad distinta a la del fluido, el cual se considera que es newtoniano con una viscosidad suficientemente alta. Cuando la dificultad teórica lo requiera, el análisis se limitará a suspensiones de partículas de igual radio, *i.e.*, *monodispersas*. Cabe mencionar, además, la posibilidad de interacciones de carácter electrostático entre las partículas; dichas interacciones no son incluidas en el sistema a modelar.

Decir que la inercia de las partículas es suficientemente grande implica que la dinámica de ellas no se ve afectada mayormente por las constantes colisiones de las moléculas del fluido sobre ellas; en este caso otros factores predominan sobre las fluctuaciones térmicas, como por ejemplo, la fuerza de gravedad; el que las partículas sean lo bastante grandes o de gran densidad es una condición suficiente para cumplir esto. dado que las partículas tienen distinta densidad a la del fluido, considerar la gravedad implica que una partícula sube (si la densidad es menor que la del fluido) o precipita hacia el fondo, *i.e.*, *sedimenta* (si la densidad es mayor). Este último caso es el que se estudiará.

En la descripción del fluido se utilizará el *límite continuo* [20]; en este límite, no es necesario considerar la información detallada de cada una de las moléculas del fluido para una adecuada des-

¹Conocido como *NESS*, en inglés (non-equilibrium steady state).

cripción de éste. Por esta razón el fluido es dividido en un conjunto de “elementos” de fluido de tamaño mesoscópico, *i.e.*, cada elemento agrupa un vasto conjunto de moléculas, pero su tamaño permanece mucho menor que una longitud macroscópica del sistema (*e.g.*, el tamaño de una partícula de la suspensión; de esta manera se pasa de un análisis en la escala de longitud molecular a una escala mesoscópica)². El siguiente paso consiste en considerar que, dado que los rápidos procesos moleculares llevan al sistema prontamente a un estado de equilibrio local, el análisis se reduce al estudio de ciertos campos que varían lentamente en el tiempo y el espacio: la energía, el momentum y la masa.

En un fluido newtoniano la relación entre el tensor de tensiones y el de la tasa de deformaciones³ es lineal. Considerar un fluido muy viscoso implica que, bajo una perturbación del estado estacionario, éste volverá rápidamente a dicho estado. Por el contrario, como las partículas tienen una gran inercia, a éstas les toma más tiempo volver al estado estacionario. Luego, aparecen claramente dos escalas de tiempo distintas: el tiempo de relajación del fluido τ_f y el de las partículas τ_p . Los fenómenos recién explicados se traducen en que τ_f es mucho menor que τ_p .

Este régimen es conocido con el nombre de “Dinámica Stokesiana”. En él, la fuerza \vec{F}_i actuando sobre la partícula i depende exclusivamente de las posiciones \vec{R}_k y velocidades \vec{U}_k de todas las demás partículas ($k \in \{1 \dots N\}$) pues, como se mencionó, en la escala de tiempo de las partículas el fluido es estacionario.

$$\vec{F}_i = \vec{F}_i(\{\vec{R}_k, \vec{U}_k\})$$

Además, si el fluido es muy viscoso, la relación entre las fuerzas y las velocidades es lineal.

$$\vec{F}_i = \sum_q \mathbb{A}_{iq}(\{\vec{R}_k\}) \vec{U}_q$$

donde el tensor \mathbb{A} relaciona la fuerza sobre la partícula i con las velocidades de cada una de las partículas del sistema. Finalmente, se considera el régimen sobreamortiguado. En este régimen el fluido es cuasi-estático, pues cualquier cambio en el flujo ya ha relajado al estado estacionario. Por lo tanto, no es necesario tomar en cuenta la detallada información de cada elemento del fluido para una descripción correcta. En este régimen la dinámica del sistema queda completamente determinada por las posiciones instantáneas de las partículas, las cuales ajustan sus desplazamientos inmediatamente de manera que las fuerzas y torques externos se cancelen con las fuerzas del fluido sobre ellas; de esta manera no hay fuerza neta sobre las partículas (por lo tanto, tampoco aceleración). El fluido queda subordinado a ser el medio que permite las interacciones entre partículas.

$$\vec{F}_{\text{Total}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{U}_i = \vec{U}_i(\{\vec{R}_k\})$$

Varios estudios acerca de este régimen en sistemas tridimensionales se han realizado, por lo que es bien conocido (no así en el caso bidimensional). Una teoría para estudiar la dinámica Stokesiana en este régimen consiste en calcular las velocidades de las partículas a partir de las conocidas fuerzas externas (*problema de movilidad*) o la fuerza externa necesaria para producir las velocidades conocidas (*problema de resistencia*). En el caso de la movilidad, para una suspensión de N partículas, uno puede escribir la ecuación para sus velocidades como

$$\vec{U} = \mathbb{M}(\vec{X}) \vec{F}_{\text{externa}}$$

²Este análisis se conoce como *coarse graining*, en inglés.

³En inglés, el tensor de tensiones se conoce como *stress* y el de tasa de deformación como *strain rate*.

donde \vec{X} es un vector de $6N$ componentes (caso tridimensional) que contienen las coordenadas espaciales de las partículas, y también angulares (en relación a un ángulo interno en cada partícula, que mide su rotación). \vec{U} tiene las velocidades espaciales y rotación de las partículas, \mathbb{M} es el *tensor movilidad* y \vec{F}_{externa} las fuerzas y torques externos sobre las partículas. Por lo tanto, si se conoce \vec{F}_{externa} (que en el caso de la sedimentación, corresponde simplemente a la fuerza de gravedad) se pueden determinar las velocidades si se tiene el tensor movilidad \mathbb{M} . La ecuación análoga para el problema de resistencia (con su correspondiente tensor resistencia \mathbb{R}) corresponde a

$$\vec{F}_{\text{externa}} = \mathbb{R}(\vec{X})\vec{U}$$

En el estudio de la sedimentación, se analizan propiedades de la suspensión a medida que ésta precipita debido al efecto de la gravedad. Por ejemplo, si se conoce la probabilidad $P(\vec{X})$ de que cierta distribución \vec{X} ocurra en el sistema, se puede calcular la velocidad promedio con que sedimentan las partículas en el estado estacionario (conocida como velocidad terminal o “velocidad de sedimentación”),

$$\langle \vec{U} \rangle = \int \mathbb{M}(\vec{X})\vec{F}P(\vec{X})d^{6N}X$$

Teóricamente este análisis es correcto, pero computacionalmente complejo. La dificultad yace en construir el tensor movilidad para las N partículas. Una opción es calcular el tensor para el caso de sólo dos partículas \mathbb{M}_2 , el cual se puede calcular en forma aproximada usando una expansión para grandes distancias. Luego, se suman las interacciones entre todos los pares de partículas para así formar \mathbb{M} . De esta manera se toman en cuenta las interacciones de campo lejano, pero no las fuerzas para partículas cercanas (campo cercano). Es posible incorporar las interacciones entre partículas cercanas utilizando el tensor resistencia; sin embargo, lo complejo de este método de análisis corresponde a la necesidad de invertir tensores que involucran muchas partículas, lo cual es costoso en términos computacionales. En esta tesis se utiliza un modelo alternativo para estudiar las interacciones entre partículas, esperando que pueda ser más eficiente en términos computacionales. Sin embargo, no se han realizado simulaciones para corroborar lo anterior.

A continuación se presentará una breve síntesis de los fenómenos hallados en tres dimensiones (interesantes análisis se pueden hallar en [10, 16, 20]). Stokes logró determinar la fuerza de arrastre sobre una esfera de radio a desplazándose en un fluido infinito de viscosidad η con una velocidad \vec{U} , con el fluido en reposo en el infinito.

$$\vec{F}_{\text{arrastre}} = -6\pi\eta a\vec{U}$$

Al dejar una partícula libre en un fluido bajo la acción de la gravedad, ésta comienza a sedimentar hacia el fondo. Eventualmente la fuerza de roce viscoso del fluido compensará a la fuerza de gravedad, de tal manera que la fuerza neta sobre la partícula se anula y ésta alcanza cierta *velocidad terminal* \vec{U}_s . La velocidad de sedimentación para una esfera puede calcularse usando el resultado anterior para el arrastre sobre una esfera, obteniéndose de este modo

$$\vec{U}_s = \frac{2}{9} \frac{a^2}{\eta} (\rho_p - \rho_f) \vec{g}$$

con ρ_f y ρ_p la densidad del fluido y la partícula, respectivamente, y \vec{g} la aceleración de gravedad.

Distinta es la situación cuando se habla de un *conjunto* de partículas, *i.e.*, una suspensión, sedimentando. Esto debido a que a medida que una partícula sedimenta, las interacciones con las demás partículas de la suspensión provocan que la velocidad terminal que ésta alcanza difiera de \vec{U}_s .

De hecho, uno podría preguntarse si en realidad existe o no un estado estacionario para este sistema; simulaciones [28] y experimentos [9] muestran que en efecto se observan estados estacionarios.

Una esfera al sedimentar provoca un flujo en el sistema el cual decae lentamente como el inverso de la distancia; este lento decaimiento implica que las interacciones hidrodinámicas en las suspensiones son de largo alcance, y ésta es la principal fuente de complejidad del estudio de las suspensiones.

Por ejemplo, un importante resultado fue aquel logrado por Batchelor [4] al calcular la velocidad de sedimentación de una suspensión uniforme de partículas (en la que cada punto del espacio tiene igual probabilidad de ocupación). Si uno intentase calcular dicha velocidad como la suma de las influencias de todas las partículas sobre una partícula de prueba, el carácter de largo alcance de las interacciones hidrodinámicas conduce a integrales divergentes. Batchelor logró superar dicha divergencia mediante ciertos arreglos algebraicos que son equivalentes a un reajuste de la presión para reflejar el incremento en la densidad promedio debido a la presencia de las partículas [19]. El resultado que obtuvo es

$$\langle \vec{U} \rangle = \vec{U}_s(1 - 6,55\Phi) + O(\Phi^2)$$

donde Φ corresponde a la fracción del volumen del sistema ocupado por las partículas y los símbolos $\langle \rangle$ indican un promedio estadístico sobre la configuración del sistema. Las suposiciones de Batchelor en el cálculo son [25]: (1) efectos inerciales despreciables, (2) interacciones hidrodinámicas entre pares de partículas, (3) una distribución uniforme de partículas en el espacio y (4) un sistema infinito en la dirección perpendicular a la gravedad. Y como se puede apreciar del punto (3), el resultado obtenido depende de la distribución de partículas en particular que se use para el cálculo.

Otro fenómeno que ha suscitado bastante interés son las fluctuaciones de la velocidad de sedimentación en relación a su promedio. A medida que sedimenta una partícula, estas interacciones de largo alcance provocan que la velocidad instantánea sea distinta de su promedio (*i.e.*, de la velocidad terminal), incluso en el régimen en que se desprecian el movimiento browniano y las fluctuaciones térmicas [35].

En tres dimensiones, Caflish and Luke [11] demostraron que para una suspensión con una distribución uniforme de partículas sedimentando en un medio infinito, calcular la varianza de la velocidad terminal considerando sólo volumen excluido conduce a una divergencia de la varianza en relación al tamaño del contenedor. Sin embargo, este resultado es poco físico. En efecto, fluctuaciones en la velocidad conducen a fluctuaciones en la densidad de la suspensión. A la vez, esta diferencia de densidades debería producir una convección que tiende a disminuir las fluctuaciones [25]. Diversos estudios contradicen la predicción de fluctuaciones divergentes de la velocidad con el tamaño del sistema [23, 25, 30, 32, 35]; en realidad, los resultados indican fluctuaciones anisótropas, siendo aquéllas en el sentido vertical del orden de la velocidad de sedimentación, y son el doble en magnitud que las fluctuaciones en el plano perpendicular a la gravedad [16].

Es interesante notar que simulaciones numéricas sin considerar una pared en el fondo del contenedor condujeron a fluctuaciones divergentes, mientras que aquellas que tomaban en cuenta el fondo entregaban como resultado fluctuaciones convergentes [21–23].

El tema de la velocidad terminal y de las fluctuaciones en suspensiones tiene ya bastante tiempo, pero hay otros interesantes fenómenos más actuales que han suscitado más investigaciones; no son analizados en esta tesis pero tienen relación con las fluctuaciones de la velocidad, por lo que es adecuado mencionarlos. Por ejemplo, se ha observado tanto experimentalmente [9, 32, 35] como numéricamente [35] la existencia de torbellinos o vórtices, que corresponden a regiones de veloci-

dades correlacionadas; claramente la presencia de torbellinos indica fluctuaciones en la velocidad. Experimentos [32] indican que estas fluctuaciones son universales, con un largo característico de las regiones correlacionadas $\xi \sim 20a\Phi^{-1/3}$ y fluctuaciones de velocidad que escalan como $\Phi^{1/3}$. Además, para celdas de tamaño menor que ξ , las fluctuaciones dependen del tamaño del sistema (lo cual conduciría a una divergencia al tomar el límite de un sistema infinito); sin embargo, para celdas de mayor tamaño que ξ , las fluctuaciones rápidamente saturan a un valor constante. Más aún, en [35] se encuentra que para celdas suficientemente anchas las fluctuaciones decaen con el tiempo, sin alcanzar un estado estacionario durante toda la duración del experimento.

Una explicación teórica de este fenómeno (propuesta por Hinch [18]) es que, tanto el fondo donde sedimentan las partículas como la interfase entre la suspensión sedimentando y el líquido libre de partículas que deja detrás de ella (éste último se conoce como el “frente de sedimentación”), actúan como sumideros de las fluctuaciones de gran escala [9, 16]. Inicialmente, el proceso de mezclado de la suspensión crea fluctuaciones de densidad en todas las escalas de longitud, desde el tamaño del contenedor hasta la separación promedio entre partículas l . Al principio, fluctuaciones de gran escala dominan el sistema – hay un agrupamiento arbitrario de partículas en un lado del sistema en comparación con el otro; esto se puede asociar a grandes fluctuaciones en la velocidad, pues este desbalance genera fuertes flujos convectivos. Sin embargo, el grupo más pesado de partículas cae al fondo del contenedor, lo cual equilibra las diferencias en densidad del sistema y consecuentemente las fluctuaciones en la velocidad, pues ya no hay nada que genere los flujos convectivos. Simulaciones [9] muestran que el tiempo que le toma a este “manchón” de partículas pesadas llegar al fondo coincide con el tiempo en que decaen las fluctuaciones de velocidad. Así, las grandes fluctuaciones (que inicialmente se presentaban como un vórtice que ocupa todo el espacio) evolucionan a una compleja estructura de fluctuaciones de más pequeña escala en forma de remolinos, con un tamaño característico de unos $20l$, que permanecen hasta la llegada del frente de sedimentación a la zona estudiada.

Estudios de este frente en suspensiones diluidas (*i.e.*, un bajo número de partículas en relación con el tamaño del sistema) [9, 14] revelan una muy interesante dinámica. El frente crece linealmente con el tiempo, lo cual es explicado en estos estudios tanto como causa de la polidispersividad de la suspensión como también por un flujo similar al explicado anteriormente — “manchones” de partículas de mayor densidad que el promedio caen alejándose del frente, reduciendo su número de partículas y conduciendo a un crecimiento como el observado. Otro modelo [27] considera que un leve gradiente vertical en la densidad del frente limita el tamaño de los remolinos, conduciendo a una ecuación de difusión no lineal y un crecimiento difusivo del frente proporcional a $t^{5/7}$.

Otra posible explicación que se discute en la literatura se basa en una estratificación en la suspensión (*i.e.*, un gradiente en la densidad) [15, 28]. Esta idea fue sugerida por Bławdziewicz alrededor de 1995, y demostrada como un mecanismo que conduce al decaimiento (y consecuentemente, control) de las fluctuaciones por Luke [26]. Posteriormente otras teorías basadas en ello han surgido (Tee *et al*, Mucha y Brenner); la idea es que una leve estratificación vertical, provocada principalmente por el crecimiento del frente de sedimentación, puede causar una reducción en las fluctuaciones.

En general, los estudios de suspensiones, tanto teóricos como experimentales, se restringen a considerar suspensiones diluidas. Esto pues para las suspensiones diluidas las ecuaciones son más simples dentro del marco teórico, y en relación a experimentos no es simple considerar densidades mayores debido a la dificultad en el seguimiento de una partícula del sistema entre todas las demás. Por lo tanto, típicamente los fenómenos mencionados anteriormente han sido estudiados en el régimen diluido. Sin embargo, es importante llevar este tipo de investigaciones a mayores densidades debido a que la mayoría de las aplicaciones prácticas ocurren a mayores densidades.

Por esto mismo resulta interesante un estudio en particular [33] en que se analizan suspensiones más densas. A medida que aumenta la densidad de partículas en el sistema, el contraflujo ascendente que surge como respuesta a la sedimentación de las partículas se vuelve cada vez más importante, y las colisiones y el hacinamiento hacen más complejas las interacciones entre partículas. Cabe dudar si los fenómenos antes mencionados seguirán presentándose en este caso, pues claramente hay nuevos factores a considerar.

A pesar de lo anterior, la interesante conclusión de este estudio es que el comportamiento en altas densidades es análogo a aquél en bajas densidades, bajo la consideración de un escalamiento apropiado en la viscosidad y velocidad de sedimentación, y que los efectos de volumen excluido por las partículas son tomados en cuenta. Por ejemplo, las zonas correlacionadas en forma de vórtices siguen presentándose, y bajo la misma ley de escalamiento ($\xi \sim 20 a \Phi^{-1/3}$).

Como se ha podido apreciar de los análisis anteriores acerca de las suspensiones, hay una gran gama de estudios para sistemas tridimensionales, en los que cada longitud del contenedor es mucho mayor que el diámetro de una partícula. Muy razonable, dada la interesante dinámica que presentan estos sistemas además de la gran importancia que presentan tanto en aplicaciones prácticas como en la vida diaria. Sin embargo, esto es igual de cierto para los sistemas confinados (cuasi-bidimensionales y unidimensionales). Ejemplos de estos sistemas [13] son los fluidos presentes en medios porosos, los flujos en estructuras biológicas (vasos sanguíneos), boquillas y dispositivos microfluidicos. Por ejemplo, un importante método de segregación (separación de partículas con respecto a su tamaño) conocido como “Fraccionamiento por Campo de Flujo” (FFF, Field Flow Fractionation) utiliza una celda-cuasi bidimensional para segregar partículas inertes o células biológicas en el régimen Browniano o no Browniano.

La miniaturización de dispositivos hidrodinámicos que funcionan en sistemas confinados como el estudiado en esta tesis ha suscitado la necesidad de un mejor entendimiento de estos sistemas. De hecho, numerosos dispositivos se caracterizan porque una de sus dimensiones no es más grande que unos pocos diámetros de las partículas. Estas razones constituyen una muy buena motivación para la realización de esta tesis acerca de suspensiones cuasi-bidimensionales. En particular, se desea saber si los problemas mencionados anteriormente (convergencia en la velocidad terminal y sus fluctuaciones, además de la dependencia en el tamaño y geometría del sistema) se presentan en suspensiones cuasi-bidimensionales.

En el capítulo 2 se empezará con el desarrollo de un modelo para poder describir las interacciones de campo lejano en una suspensión cuasi-bidimensional, explicando con mayor detalle el sistema considerado; esta teoría fue desarrollada inicialmente por la Dra. Alejandra Álvarez en su tesis de doctorado [1, 2], y en este capítulo se continúa con el desarrollo de manera de lograr un modelo más preciso. Se obtienen expresiones analíticas para los campos de presión y velocidad del fluido además de la fuerza hidrodinámica de campo lejano, sin incorporar el campo cercano (las interacciones entre partículas cercanas) en forma precisa.

La fuerza de campo lejano es la que determina la dinámica en la escala macroscópica, la cual no se ve afectada en forma directa por el campo cercano. Sin embargo, las fuerzas de campo cercano sí afectan en forma indirecta a esta dinámica, pues modifican la intensidad del campo lejano. Por lo tanto, si se desea una precisa descripción de las fuerzas, ambos campos han de ser tomados en cuenta. Sin embargo, las interacciones de campo cercano ya fueron estudiadas en la tesis mencionada antes [1] utilizando la teoría de lubricación, y la incorporación de este campo en realidad corresponde a una aplicación particular de una teoría ya conocida. Por lo tanto, dado que calcular el campo cercano no aportaba nuevos conocimientos, esta tesis se centró en el campo lejano. En otras palabras, mediante este análisis esta tesis busca recuperar la dinámica más importante en el sistema.

Se ha de mencionar también que, siguiendo la misma línea que se usó en [1], no se tomó en cuenta la fuerza que las dos placas que confinan al fluido ejercen sobre las partículas, como tampoco el torque sobre ellas. En esta tesis se explica que el efecto neto de la fuerza debido a las placas es simplemente el de acelerar el proceso en que el sistema alcanza el estado estacionario. Con respecto al torque, éste no fue considerado porque, como se explica en [1] actúa como una fuerza de roce que tiende a frenar la rotación de la partícula; más aún, en [1] se obtiene este resultado como consecuencia del campo cercano, siendo nulo el torque debido al campo lejano. Dado que esta tesis se centra en el campo lejano, ésta es otra razón para no considerar el torque.

En el capítulo 2 se recupera el importante resultado obtenido en [1] con respecto a las interacciones hidrodinámicas: decaen con la distancia como R^{-2} , más rápido que en el caso tridimensional, que decae como R^{-1} ; y la fuerza hidrodinámica sobre una partícula presenta un término de “antiarrastre” (explicado con más detalles en este capítulo). Estos fenómenos fueron observados experimentalmente [13].

Al calcular propiedades importantes del sistema como las mencionadas anteriormente (*e.g.*, la velocidad de sedimentación), se encuentran ciertas dificultades similares a las encontradas en tres dimensiones; específicamente, las expresiones que determinan las cantidades físicas involucran integrales que no son completamente convergentes (*i.e.*, convergen al integrar en una variable de integración pero divergen al integrar en la otra variable). Para solucionar este problema, en el capítulo 3 se incorpora el efecto de las paredes en la teoría, gracias a lo cual se obtiene un modelo autoconsistente.

Con a lo anterior, en el capítulo 4 se procede a calcular la velocidad de sedimentación del sistema estudiado, y en el capítulo 5 se calcula la desviación estándar de la velocidad, ambos cálculos considerando términos hasta primer orden. Se finaliza este capítulo con un resumen de los resultados obtenidos. Una importante conclusión es que, para los sistemas estudiados en esta tesis (suspensiones diluidas en sistemas suficientemente grandes como para considerar partículas alejadas de las paredes perpendiculares al desplazamiento), ambas cantidades resultan ser independientes del tamaño y la geometría del sistema, a diferencia del caso en tres dimensiones (recordar el análisis de las fluctuaciones de la velocidad, realizado anteriormente).

Finalmente, como se explicó antes, los resultados que se obtienen al calcular promedios estadísticos dependen de la distribución configuracional del sistema (*i.e.*, la densidad de probabilidad de que el sistema se encuentre en cierta configuración en particular). Principalmente, los resultados dependen de la función distribución de pares $g^{(2)}(\vec{r}_i, \vec{r}_k)$ con \vec{r}_i, \vec{r}_k las posiciones de las partículas i y k . Para entender mejor su significado, se puede considerar que la siguiente cantidad

$$g^{(2)}(\vec{r}_i, \vec{r}_k) d^2 r_i d^2 r_k$$

corresponde a la probabilidad de encontrar una partícula en la posición \vec{r}_k dado que hay una partícula en \vec{r}_i . A lo largo de la tesis queda de manifiesto que para suspensiones diluidas la principal contribución en los cálculos está dado por esta función, lo cual indica que las interacciones entre pares de partículas son las que determinan la dinámica del sistema. Sin embargo, a medida que se consideran suspensiones más densas, las interacciones entre tríos de partículas dejan de ser despreciables, por lo que hay que estudiar también las demás funciones distribución (*i.e.*, de tríos, de cuartetos, etc.).

La distribución utilizada en algunos estudios teóricos y mencionada anteriormente, de una suspensión uniforme de partículas en la que la única consideración que se toma en cuenta es la del espacio excluido por las partículas, implica despreciar las interacciones hidrodinámicas. Esta aproximación para la función distribución es utilizada en los cálculos realizados en los capítulos 4 y

5.

Esta aproximación resulta un tanto fuerte, pero permite al menos obtener resultados a primer orden que se pueden mejorar mediante mejores modelos. Un ejemplo es usar la distribución de Percus-Yevick, que corresponde a la distribución de equilibrio de una suspensión de partículas sin diferencia de densidad con el fluido; esta distribución es otra aproximación de la distribución de pares [20].

Es interesante mencionar que esta aproximación ya ha sido utilizada varias veces en la literatura [4–8, 11] y con razonable precisión [20]; vale la pena mencionar que Ladd [22, 28] obtiene mediante simulaciones en un sistema con condiciones de borde periódicas (*i.e.*, sin paredes confinantes) que la función correlación de pares $h^{(2)}$ (la cual se define como $h^{(2)} = g^{(2)} - 1$) para la sedimentación en estado estacionario no difiere demasiado de aquella de esferas que no se traslapan para grandes separaciones, aunque existen diferencias cuantitativas para separaciones pequeñas. Cabe mencionar, además, que en experimentos se intenta obtener una suspensión uniforme de partículas en el proceso inicial de mezclado entre las partículas y el fluido; sin embargo, el resultado obtenido, a pesar de ser visualmente uniforme, puede no corresponder a una distribución uniforme en el sentido probabilístico, *i.e.*, en que cada posición del sistema tiene una igual probabilidad de ser ocupado por una partícula [15].

De todas maneras, la aplicabilidad de esta aproximación para suspensiones cuasi-bidimensionales no es clara, y aun así ciertamente ha de haber mejores expresiones para la función distribución [25]. Por esta misma razón, en el capítulo 6 se procede a desarrollar un modelo para determinar esta densidad de probabilidad a partir de la Mecánica Estadística.

Capítulo 2

La expansión cuadrupolar

Resumen

En el presente capítulo se explica con mayor detalle el sistema cuasi-bidimensional que se desea modelar. A partir de las ecuaciones generales para fluidos viscosos se deducen las ecuaciones de Stokes; incorporando que se estudia una dinámica de interacciones de campo lejano en dos dimensiones se obtiene el *modelo de Hele-Shaw*. A partir de este sistema de ecuaciones, utilizando la teoría de ecuaciones de integrales de borde, se obtienen expresiones para la presión y velocidad del fluido, gracias a lo cual se puede calcular la fuerza hidrodinámica de campo lejano.

2.1. Sistema

El sistema a estudiar consiste en una suspensión bidimensional confinada compuesta por N partículas sólidas que se desplazan a través de un fluido newtoniano incompresible de viscosidad dinámica η . El fluido se encuentra confinado entre dos paredes paralelas a una distancia $2H$ una de otra en la dirección del eje z (con $z = 0$ equidistante de ambas placas), siendo infinito en las otras dos direcciones x e y .

El objetivo es desarrollar un modelo que sirva para describir las interacciones hidrodinámicas de campo lejano (*i.e.*, entre partículas lejanas entre sí). Esto debido a que en suspensiones con una densidad de partículas leve el número de partículas cercanas entre sí es bajo y, por ende, las interacciones de campo cercano (entre partículas cercanas) no son tan importantes en comparación con las interacciones de campo lejano al momento de describir el sistema. En otras palabras, la dinámica más interesante corresponde a aquella generada por el campo lejano.

El objetivo es estudiar las interacciones de largo alcance entre las partículas, para lo cual se utilizarán cilindros de altura L (ligeramente menor que $2H$), radios a_i ($i \in \{1, \dots, N\}$) y masa m . El sistema que se desearía modelar en realidad consideraría esferas en vez de discos (ver figura 2.1); sin embargo, este cambio de geometría de las partículas no debería ser relevante si sólo estamos interesados en el campo lejano, y tiene la ventaja de hacer más sencillo el análisis. Estos discos se pueden desplazar a lo largo del plano xy (sin rotación) y la velocidad del disco i -ésimo se denotará por \vec{U}_i (ver figura 2.2).

La ecuación más general que describe a un fluido viscoso es [24]

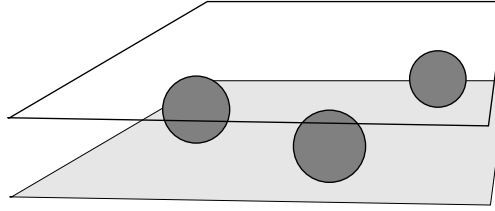


Figura 2.1: Sistema bidimensional con esferas como partículas.

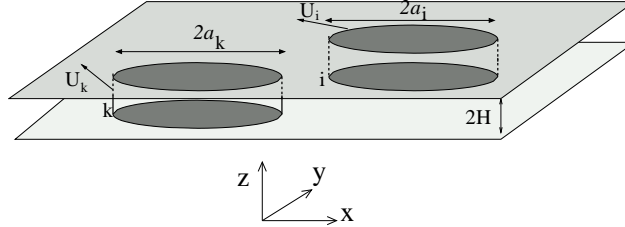


Figura 2.2: Sistema que se utilizará, considerando discos para las partículas.

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v} \right) = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \sigma' \quad (2.1)$$

donde σ' es el *tensor de tensiones de la viscosidad*

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right) + \zeta \delta_{ik} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \quad (2.2)$$

En las ecuaciones (2.1) y (2.2), \vec{v} y p corresponden al campo de velocidad y la presión del fluido, respectivamente; ρ es la densidad del fluido; η y ζ son sus coeficientes de viscosidad. Estos coeficientes dependen, en general, de la presión y la temperatura, pero usualmente varían poco en el fluido estudiado, por lo que serán considerados constantes.

Si además de la consideración anterior se añade el hecho de que se estudia un fluido incompresible, *i.e.*, $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$, se obtiene finalmente que las ecuaciones que describen la dinámica del sistema son las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido incompresible¹.

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v} \right) &= -\vec{\nabla} p + \eta \nabla^2 \vec{v} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{v} &= 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

Como se puede observar, es una ecuación vectorial no lineal; sin embargo, bajo cierto régimen es posible simplificar esta ecuación. Si las partículas son suficientemente más densas que el fluido (*i.e.*, las partículas tienen una mayor inercia), entonces, al estudiar el sistema en la escala de tiempo de las partículas, se puede despreciar el lado izquierdo de (2.3) (recordar el análisis de las escalas de tiempo dada en la Introducción) y el fluido puede ser descrito mediante las *ecuaciones de Stokes*

¹Se recuerda que se estudia un sistema en el que se desprecia el movimiento browniano.

$$-\vec{\nabla}p + \eta \nabla^2 \vec{v} = 0 \quad (2.4)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.5)$$

La aproximación utilizada puede ser entendida considerando el *número de Reynolds* Re . Si U y L denotan una velocidad y largo característicos del sistema, el número adimensional Re se define como

$$Re = \frac{UL\rho}{\eta} \quad (2.6)$$

Un análisis dimensional de la ecuación (2.3) resulta esclarecedor: el término $\rho(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v}$ del lado izquierdo es del orden de $\rho U^2/L$, y representa a los efectos inerciales. El término $\eta \nabla^2 v$ del lado derecho es del orden $\eta U/L^2$ y representa a las fuerzas viscosas. El cociente entre los dos es

$$\frac{\rho U^2}{L} \frac{L^2}{\eta U} = \frac{UL\rho}{\eta} = Re$$

La aproximación que conduce a las ecuaciones de Stokes equivale a $Re \ll 1$, *i.e.*, al caso en que las fuerzas inerciales son despreciables frente a la viscosidad. También es importante mencionar que esto además implica flujos estables pues, experimentalmente, es posible tener flujos estacionarios estables para Re menor a cierto número crítico de Reynolds Re_{cr} , más allá del cual el flujo se vuelve inestable.

Si además se considera el hecho de que para las partículas se utilizan cilindros de altura cercana a la separación entre las paredes que confinan al fluido, entonces las ecuaciones se reducen al *modelo de Hele-Shaw*, deducción que sigue a continuación.

Primero, dado que la altura de los cilindros es muy cercana al espaciamiento entre las paredes, los desplazamientos en el eje z son mucho menores en comparación a aquellos en el plano xy . Esto conduce a aproximar $v_z = 0$, es decir, simplemente no hay movimiento en z .

La segunda aproximación proviene de considerar que las variaciones en los parámetros del sistema son mucho más suaves en el plano xy , siendo más bruscas en el sentido del eje z . Esto es equivalente a decir

$$\frac{\partial}{\partial z} \gg \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \quad (2.7)$$

Por lo tanto, las derivadas en el sentido del eje x o y pueden despreciarse frente a aquellas en el sentido del eje z . Hay que usar ambas de estas consideraciones en las ecuaciones de Stokes (2.4) y (2.5). Primero,

$$\eta \nabla^2 \vec{v} = \eta \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \vec{v} \simeq \eta \frac{\partial^2}{\partial z^2} \vec{v} \quad (2.8)$$

Al tomar la divergencia de la ecuación (2.4), la divergencia conmuta con el laplaciano y la velocidad se anula gracias a la ecuación (2.5).

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (-\vec{\nabla}p + \eta \nabla^2 \vec{v}) &= 0 \\ \nabla^2 p &= 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

Por lo tanto, las ecuaciones que se han obtenido (por componentes) son

$$\eta \frac{\partial^2}{\partial z^2} v_x = \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2.10)$$

$$\eta \frac{\partial^2}{\partial z^2} v_y = \frac{\partial p}{\partial y} \quad (2.11)$$

$$0 = \frac{\partial p}{\partial z} \quad (2.12)$$

$$\nabla^2 p = 0 \quad (2.13)$$

La ecuación (2.13) se obtuvo en (2.9). Las ecuaciones (2.10), (2.11) y (2.12) se deducen a partir de (2.4) y (2.7); (2.12) resulta de considerar además que $v_z = 0$. Esta ecuación indica que la presión no depende de z , por lo que se puede integrar el primer par de ecuaciones en z considerando el lado derecho como una constante. Si se define $\nabla_{//}$ como el gradiente en el plano xy , *i.e.*, $\nabla_{//} = \hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y}$, entonces las ecuaciones (2.10) y (2.11) se pueden escribir como

$$\eta \frac{\partial^2}{\partial z^2} \vec{v} = \nabla_{//} p$$

Integrando en z ,

$$\vec{v} = \frac{\nabla_{//} p}{\eta} \frac{z^2}{2} + Bz + C \quad (2.14)$$

con B y C constantes de integración que se determinan a partir de la condición de borde de *no deslizamiento* en las paredes, *i.e.*, $\vec{v}(z=H) = \vec{v}(z=-H) = 0$. Esto entrega $B = 0$ y $C = -(H^2 \nabla_{//} p)/(2\eta)$. Por lo tanto,

$$\vec{v} = \frac{\nabla_{//} p}{\eta} \left(\frac{z^2}{2} - \frac{H^2}{2} \right) = -\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{//} p \left(1 - \frac{z^2}{H^2} \right) \quad (2.15)$$

Definiendo $\vec{v}_{//}(x,y) \equiv -\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{//} p$, y considerando que $\nabla^2 p = \nabla_{//}^2 p$ pues p no depende de z , se obtiene finalmente el modelo de Hele-Shaw

$$\vec{v}(x,y,z) = \left(1 - \frac{z^2}{H^2} \right) \vec{v}_{//}(x,y) \quad (2.16)$$

$$\vec{v}_{//}(x,y) = -\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{//} p \quad (2.17)$$

$$\nabla_{//}^2 p = 0 \quad (2.18)$$

Se ha de notar que el modelo anterior también es válido para partículas esféricas cuando se desea estudiar solamente los efectos de campo lejano, pues los detalles geométricos de las partículas no son considerados en el modelo de Hele-Shaw. Un análisis distinto se debe realizar si se desea estudiar las interacciones de campo cercano.

La ecuación de Laplace para la presión p se debe acompañar con apropiadas condiciones de borde en la superficie de cada partícula.

$$\vec{v}(x,y) \cdot \hat{n} = \vec{U}_i \cdot \hat{n} \quad (2.19)$$

donde $\bar{\vec{v}}$ corresponde al promedio en z del campo de velocidad. La condición de borde (2.19) corresponde a imponer que la componente normal del campo de velocidad del fluido a la superficie de una partícula es igual a la velocidad de esta misma partícula (condición de borde de *no penetración*). Como se puede apreciar, esta condición solamente considera la componente perpendicular a la superficie; ésta es otra razón por la que no se estudia el torque sobre las partículas, pues éste implica una condición tangencial (debido al tipo de ecuaciones diferenciales del modelo de Hele-Shaw, no se pueden imponer condiciones de borde tangenciales en una superficie).

Utilizando la ecuación (2.16), se tiene que

$$\begin{aligned}\bar{\vec{v}}(x,y) &= \frac{1}{2H} \int \left(1 - \frac{z^2}{H^2}\right) \vec{v}_{\parallel}(x,y) dz \\ &= \frac{2}{3} \vec{v}_{\parallel}(x,y) = -\frac{2}{3} \left(\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{\parallel} p\right)\end{aligned}$$

donde se hizo uso de (2.17) para expresar la condición de borde en función de la presión. Definiendo $\tilde{\vec{U}}_i \equiv (3/2)\vec{U}_i$, se tiene que la condición de borde (2.19) se puede escribir de la siguiente manera

$$-\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{\parallel} p \cdot \hat{n} = \tilde{\vec{U}}_i \cdot \hat{n} \quad (2.20)$$

2.2. Expansión cuadrupolar

La teoría de ecuaciones de integrales de borde BIE² indica que las ecuaciones (2.18) y (2.20) admiten soluciones en término de integrales de borde (este enfoque fue usado por la Dra. Álvarez; ver [1, 2, 31])

$$p(\vec{r}) = -\sum_{i=1}^N a_i \int_0^{2\pi} \omega_i(\phi_i) \ln(\|\vec{r} - \vec{r}_i\|) d\phi_i \quad (2.21)$$

donde el vector \vec{r}_i apunta hacia la superficie de la partícula i y ϕ_i es el ángulo de integración en esta partícula (ver figura 2.3). Las *densidades de borde* ω_i satisfacen la siguiente ecuación

$$\begin{aligned}\omega_i(\phi_i) &= -\frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \omega_k(\phi_k) \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_k) \cdot \hat{n}_i}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_k\|^2} d\phi_k \\ &\quad + \frac{2\eta}{\pi H^2} \tilde{\vec{U}}_i \cdot \hat{n}_i\end{aligned} \quad (2.22)$$

Para calcular las integrales anteriores, se procede a expandir ω en una serie de Fourier

$$\omega_i(\phi_i) = \alpha_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^i \cos(n\phi_i) + \beta_n^i \sin(n\phi_i)$$

Sin embargo, para que las expresiones (2.21) y (2.22) sean soluciones válidas para p y ω la teoría BIE indica que es necesario imponer la siguiente condición

²“Boundary Integral Equations”, en Inglés.

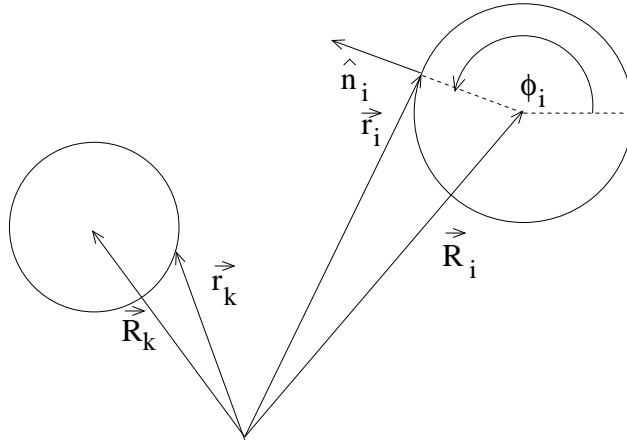


Figura 2.3: Diversos vectores involucrados en los cálculos. \vec{R}_i apunta al centro de la partícula i y \vec{r}_i a un punto de su superficie. \hat{n}_i es el vector normal a la superficie de la partícula, con origen en el punto \vec{r}_i ; de esta manera se puede definir el ángulo ϕ_i entre cierto eje fijo y \hat{n}_i . La arbitrariedad en elegir este eje no influye pues en las fórmulas (2.21) y (2.22) se integra entre 0 y 2π .

$$\int \omega_i(\phi) d\phi = 0$$

Esta condición implica que el término α_0 de la expansión es cero. Dada la complejidad de calcular todos los términos de la expansión de Fourier, se conservará hasta el término cuadrupolar (*i.e.*, $n = 2$), esperando que los demás términos de la expansión no influyan de manera importante en el resultado final (un argumento que apoya esta aproximación será dado más adelante). De esta manera,

$$\omega_i(\phi_i) \simeq \alpha_1^i \cos(\phi_i) + \beta_1^i \sin(\phi_i) + \alpha_2^i \cos(2\phi_i) + \beta_2^i \sin(2\phi_i) \quad (2.23)$$

El siguiente paso corresponde a reemplazar la expresión (2.23) en (2.22). Se define: $\vec{r}_i = \vec{R}_i + a_i \hat{n}_i$; $\vec{n}_i = a_i \hat{n}_i$, en que \vec{R}_i apunta hacia el centro del disco i y \vec{n}_i apunta hacia un punto del manto del disco i y es perpendicular a la superficie (ver figura 2.3); además se define $\vec{R}_{ik} = \vec{R}_i - \vec{R}_k$ (ver figura 2.4), con lo que se tiene que la ecuación (2.22) queda

$$\begin{aligned} \omega_i(\phi_i) \approx & -\frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \left\{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \beta_1^k \sin(\phi_k) + \alpha_2^k \cos(2\phi_k) + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \right\} \frac{(\vec{n}_i - \vec{n}_k + \vec{R}_{ik}) \cdot \hat{n}_i}{\|\vec{n}_i - \vec{n}_k + \vec{R}_{ik}\|^2} d\phi_k \\ & + \frac{2\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \cdot \hat{n}_i \end{aligned} \quad (2.24)$$

Se procede a definir $\vec{D}_{ik} \equiv \vec{n}_k - \vec{R}_{ik}$; definiendo el eje \hat{x} según \vec{U}_i y ψ_{ik} como el ángulo que \vec{D}_{ik} forma con el eje \hat{x} (ver figura 2.4), se tiene entonces que $\vec{U}_i \cdot \hat{n}_i = U_i \hat{x} \cdot \hat{n}_i = U_i \cos(\phi_i)$ y $\vec{D}_{ik} \cdot \hat{n}_i = D_{ik} \cos(\phi_i - \psi_{ik})$ (ver figura 2.4). Se utilizan estas definiciones en la ecuación (2.24) y se obtiene

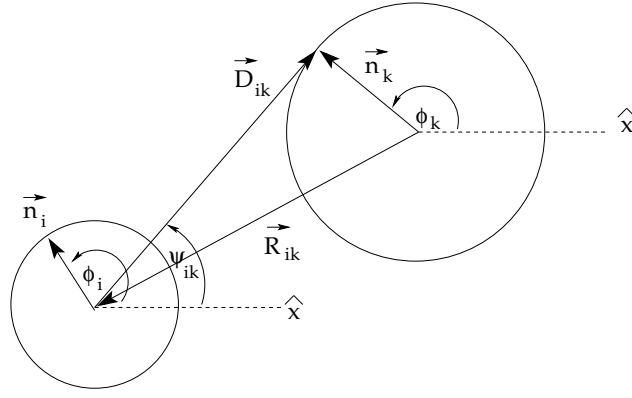


Figura 2.4: Nuevos vectores definidos. \vec{R}_{ik} apunta desde el centro de la partícula k hacia el centro de la partícula i . \vec{n}_i tiene origen en el centro de la partícula i y apunta a su superficie, paralelo a \hat{n}_i . Se eligió el eje \hat{x} (que define al ángulo ϕ de cada partícula) paralelo a \vec{U}_i , el vector velocidad de la partícula i . \vec{D}_{ik} apunta desde el centro de la partícula i hacia el vector \vec{n}_k . El ángulo ψ_{ik} es el ángulo entre \hat{x} y \vec{D}_{ik} .

$$\begin{aligned}
\omega_i(\phi_i) &\approx \alpha_1^i \cos(\phi_i) + \beta_1^i \sin(\phi_i) + \alpha_2^i \cos(2\phi_i) + \beta_2^i \sin(2\phi_i) \\
&\approx -\frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \left\{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \beta_1^k \sin(\phi_k) + \alpha_2^k \cos(2\phi_k) + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \right\} \times \\
&\quad \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i - \psi_{ik}))}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i - \psi_{ik}))} d\phi_k + \frac{2\eta}{\pi H^2} \tilde{U}_i \cos(\phi_i)
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Para despejar los coeficientes se utiliza la ortogonalidad de senos y cosenos; por ejemplo, si se desea despejar α_1^i se ha de calcular

$$\int_0^{2\pi} (\text{ecuación (2.25)}) \frac{\cos(\phi_i)}{\pi} d\phi_i$$

De esta manera los términos con α_2^i, β_1^i y β_2^i se anularán al integrar y sólo sobrevivirá el que interesa ³.

Se procede entonces a despejar cada coeficiente mediante esta técnica; se usará el cambio de variables $\phi_i \rightarrow \phi_i + \psi_{ik}$, pues de esta manera el denominador de las integrales queda de una manera más simple para la integración. Este cambio de variables no modifica los límites de integración pues, dado que se integra en una circunferencia, este cambio es equivalente a una simple rotación de dicha circunferencia. Los resultados obtenidos son

³Recordar que $\int_0^{2\pi} \cos(j\phi) \cos(k\phi) d\phi = \int_0^{2\pi} \sin(j\phi) \sin(k\phi) d\phi = \pi \delta_{jk}$, $\int_0^{2\pi} \cos(j\phi) \sin(k\phi) d\phi = 0$

$$\alpha_1^i = -\frac{1}{\pi^2} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \cos(\phi_i + \psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} + \frac{2\eta}{\pi H^2} \tilde{U}_i \quad (2.26)$$

$$\beta_1^i = -\frac{1}{\pi^2} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \sin(\phi_i + \psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} \quad (2.27)$$

$$\alpha_2^i = -\frac{1}{\pi^2} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \cos(2\phi_i + 2\psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} \quad (2.28)$$

$$\beta_2^i = -\frac{1}{\pi^2} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \sin(2\phi_i + 2\psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} \quad (2.29)$$

Es importante notar que las integrales con $k = i$ en las ecuaciones (2.26) a (2.29) son casos que se han de tratar con cuidado, pues las dos integrales que aparecen en el lado derecho de cada ecuación involucran una integración en la misma circunferencia. Por lo tanto, primero se mostrarán todos los cálculos para el caso $k \neq i$.

- Cálculo de α_1^i . Se tiene que

$$\int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \cos(\phi_i + \psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} = -\frac{\pi}{D_{ik}} \cos(\psi_{ik}) \quad (2.30)$$

Es conveniente reescribir este resultado de la siguiente manera

$$-\frac{\pi \cos(\psi_{ik}) D_{ik}}{D_{ik} D_{ik}} = -\frac{\pi \vec{D}_{ik} \cdot \hat{x}}{D_{ik}^2} = -\frac{\pi (\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}) \cdot \hat{x}}{\|\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}\|^2} \quad (2.31)$$

Si se define un ángulo θ tal que $\vec{R}_{ik} \cdot \hat{x} = R_{ik} \cos(\theta)$; $\vec{R}_{ik} \cdot \hat{y} = R_{ik} \sin(\theta)$, entonces la integral para α_1^i se puede reescribir como

$$\alpha_1^i = \frac{1}{\pi} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \} \frac{(a_k \cos(\phi_k) - R_{ik} \cos(\theta))}{a_k^2 + R_{ik}^2 - 2a_k R_{ik} \cos(\phi_k - \theta)} + \frac{2\eta}{\pi H^2} \tilde{U}_i \quad (2.32)$$

Para la integración conviene realizar el cambio de variables $\phi_k \rightarrow \phi_k + \theta$, pues de esta manera la expresión en el denominador es mejor manejado por el software que se utilice para el

cálculo. Luego de realizar la integración se obtiene

$$\begin{aligned}\alpha_1^i &= \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left\{ \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 \left[\alpha_1^k (1 - 2 \cos^2(\theta)) + \beta_1^k (-2 \sin(\theta) \cos(\theta)) \right] \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^3 \left[\alpha_2^k (3 \cos(\theta) - 4 \cos^3(\theta)) + \beta_2^k (\sin(\theta) - 4 \sin(\theta) \cos^2(\theta)) \right] \right\} + \frac{2\eta}{\pi H^2} \tilde{U}_i\end{aligned}\quad (2.33)$$

■ Cálculo de β_1^i . Dado que

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \sin(\phi_i + \psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} &= -\frac{\pi}{D_{ik}} \sin(\psi_{ik}) \\ &= -\frac{\pi \sin(\psi_{ik}) D_{ik}}{D_{ik}^2} = -\frac{\pi \vec{D}_{ik} \cdot \hat{y}}{D_{ik}^2} = -\frac{\pi (\vec{n}_k \cdot \hat{y} - \vec{R}_{ik} \cdot \hat{y})}{\|\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}\|^2}\end{aligned}\quad (2.34)$$

Se tiene que la integral para β_1^i se puede escribir de la siguiente manera

$$\beta_1^i = \frac{1}{\pi} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \left\{ \alpha_1^k \cos(\phi_k + \theta) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k + 2\theta) \right\} \frac{(a_k \sin(\phi_k + \theta) - R_{ik} \sin(\theta))}{a_k^2 + R_{ik}^2 - 2a_k R_{ik} \cos(\phi_k)}\quad (2.35)$$

donde se ha utilizado el cambio de variables mencionado anteriormente, *i.e.*, $\phi_k \rightarrow \phi_k + \theta$. El resultado obtenido es

$$\begin{aligned}\beta_1^i &= \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left\{ \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 \left[\alpha_1^k (-2 \sin(\theta) \cos(\theta)) + \beta_1^k (2 \cos^2(\theta) - 1) \right] \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^3 \left[\alpha_2^k (\sin(\theta) - 4 \sin(\theta) \cos^2(\theta)) + \beta_2^k (-3 \cos(\theta) + 4 \cos^3(\theta)) \right] \right\}\end{aligned}\quad (2.36)$$

Los resultados (2.33) y (2.36) se pueden escribir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} \alpha_1^i \\ \beta_1^i \end{bmatrix} &= \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left\{ \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 \begin{bmatrix} 1 - 2 \cos^2(\theta) & -2 \sin(\theta) \cos(\theta) \\ -2 \sin(\theta) \cos(\theta) & -1 + 2 \cos^2(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^k \\ \beta_1^k \end{bmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^3 \begin{bmatrix} 3 \cos(\theta) - 4 \cos^3(\theta) & \sin(\theta) - 4 \sin(\theta) \cos^2(\theta) \\ \sin(\theta) - 4 \sin(\theta) \cos^2(\theta) & -3 \cos(\theta) + 4 \cos^3(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_2^k \\ \beta_2^k \end{bmatrix} \right\} + \frac{2\eta}{\pi H^2} \begin{bmatrix} \tilde{U}_i \\ 0 \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (2.37)$$

Un nuevo planteamiento surge

$$\omega_i = \alpha_1^i \cos(\phi_i) + \beta_1^i \sin(\phi_i) + \alpha_2^i \cos(2\phi_i) + \beta_2^i \sin(2\phi_i) \quad (2.38)$$

$$\omega_i = \vec{d}_i \cdot \hat{n}_i + \hat{n}_i \cdot \mathbf{Q}_i \cdot \hat{n}_i \quad (2.39)$$

donde

$$\hat{n}_i = \begin{bmatrix} \cos(\phi_i) \\ \sin(\phi_i) \end{bmatrix} ; \vec{d}_i = \begin{bmatrix} \alpha_1^i \\ \beta_1^i \end{bmatrix} ; \mathbf{Q}_i = \begin{bmatrix} \alpha_2^i & \beta_2^i \\ \beta_2^i & -\alpha_2^i \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

Reemplazar estas expresiones en la ecuación (2.39) y un poco de álgebra permiten obtener la ecuación (2.38). Escribir la expresión (2.38) en su forma tensorial (2.39) presenta una importante ventaja, pues (2.39) no depende del sistema de referencia elegido. En efecto, como se recordará, en el cálculo desarrollado anteriormente se había definido un eje \hat{x} según el cual el ángulo ϕ esta definido. Por lo tanto, al cambiar \hat{x} cambia ϕ ; en cambio, los vectores \hat{n}_i, \vec{d}_i y el tensor \mathbf{Q} no dependen de esta elección.

De esta manera se concluye que la ecuación (2.37) que se ha obtenido es una ecuación para \vec{d}_i que se puede escribir de la siguiente manera

$$\vec{d}_i = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \mathbf{K}_{ik} \vec{d}_k + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \mathbf{L}_{ik} \mathbf{Q}_k + \frac{2\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \quad (2.41)$$

El vector \vec{d} se denominará *vector dipolar* y el tensor simétrico y de traza nula \mathbf{Q} se denominará *tensor cuadrupolar*. Usando la convención de que índices repetidos se suman, esta expresión se puede escribir como

$$(\vec{d}_i)_m = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N (\mathbf{K}_{ik})_{mp} (\vec{d}_k)_p + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N (\mathbf{L}_{ik})_{mnl} (\mathbf{Q}_k)_{nl} + \frac{2\eta}{\pi H^2} (\vec{U}_i)_m \quad (2.42)$$

Comparando con la ecuación (2.37) se deduce que

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{ik} &= \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 \begin{bmatrix} 1 - 2 \cos^2(\theta) & -2 \sin(\theta) \cos(\theta) \\ -2 \sin(\theta) \cos(\theta) & -1 + 2 \cos^2(\theta) \end{bmatrix} \\ &= \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 \begin{bmatrix} -\cos(2\theta) & -\sin(2\theta) \\ -\sin(2\theta) & \cos(2\theta) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Como se puede apreciar, \mathbf{K} es un tensor simétrico y de traza nula; se desea escribir esta expresión en notación tensorial por la misma ventaja mencionada anteriormente, independencia en el sistema de referencia. A continuación se explica el método que se usa para deducir su expresión tensorial, método que se utilizará más adelante para deducir las expresiones tensoriales de otros tensores.

Primero, se observa que \mathbf{K} es un tensor de dos índices. Por lo tanto, se piensa cuáles tensores se pueden usar que tengan dos índices y que estén formados con los parámetros del sistema.

El más simple de imaginar corresponde al tensor identidad $(\mathbb{I})_{pq} = \delta_{pq}$; además, el único vector asociado al tensor \mathbb{K} es el vector separación relativa \vec{R}_{ik} entre la partícula k y la partícula i . Usando la notación

$$\hat{R}_p = \left(\frac{\vec{R}_{ik}}{R_{ik}} \right)_p$$

se puede construir una diádica con este tensor unitario

$$\hat{R}\hat{R} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{bmatrix} [\cos(\theta) \ \sin(\theta)] = \begin{bmatrix} \cos^2(\theta) & \sin(\theta)\cos(\theta) \\ \sin(\theta)\cos(\theta) & \sin^2(\theta) \end{bmatrix}$$

El segundo paso consiste en proponer una combinación lineal genérica usando estos dos tensores, que para ciertos valores de sus coeficientes será igual al tensor \mathbb{K} , *i.e.*,

$$(\mathbb{K}_{ik})_{pq} = \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 [\mu \delta_{pq} + \nu \hat{R}_p \hat{R}_q] \quad (2.44)$$

para ciertos valores adecuados de μ y ν . Esta es la combinación lineal más general que se puede pensar para formar un tensor de dos índices, considerando que sólo se puede usar el vector \hat{R} y la identidad. Uno podría pensar que también se pueden hacer combinaciones entre estos términos, pero al agregar otro término que tenga el mismo índice esto implicaría una suma en dicho índice que invalidaría el análisis. Por ejemplo,

$$\begin{aligned} \delta_{pq} \hat{R}_p &= \hat{R}_q \\ \hat{R}_q \hat{R}_q \hat{R}_p &= \left(\sum_{q=1}^2 \hat{R}_q \hat{R}_q \right) \hat{R}_p = \hat{R}_p \end{aligned}$$

El tercer paso corresponde a igualar término a término la expresión (2.44) con (2.43). Por ejemplo,

$$\begin{aligned} (\mathbb{K}_{ik})_{11} &= \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 [\mu \delta_{11} + \nu \hat{R}_1 \hat{R}_1] \\ &= \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 [\mu + \nu \cos^2(\theta)] \end{aligned}$$

Esta expresión se iguala al término '11' de (2.43)

$$(\mathbb{K}_{ik})_{11} = \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^2 [1 - 2 \cos^2(\theta)]$$

Con lo que se obtiene $\mu = 1$ y $\nu = -2$. Se puede corroborar que con estos valores de μ y ν se cumple la igualdad para los demás términos. Por lo tanto se concluye que

$$(\mathbb{K}_{ik})_{pq} = \left(\frac{a_k}{R_{ik}}\right)^2 [\mathbb{I}_{pq} - 2\hat{R}_p\hat{R}_q] \quad (2.45)$$

Continuando con el desarrollo, de las ecuaciones (2.37) y (2.42) se deduce que

$$\mathbb{L}_{ik}\mathbb{Q}_k = \left(\frac{a_k}{R_{ik}}\right)^3 \begin{bmatrix} 3\cos(\theta) - 4\cos^3(\theta) & \sin(\theta) - 4\sin(\theta)\cos^2(\theta) \\ \sin(\theta) - 4\sin(\theta)\cos^2(\theta) & -3\cos(\theta) + 4\cos^3(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_2^k \\ \beta_2^k \end{bmatrix} \quad (2.46)$$

$$\equiv \left(\frac{a_k}{R_{ik}}\right)^3 \widehat{\mathbb{L}}_{ik}\mathbb{Q}_k \quad (2.47)$$

donde se ha definido el tensor $\widehat{\mathbb{L}}_{ik}$ como el equivalente adimensional de \mathbb{L}_{ik} . Se debe construir este tensor; considerando que \mathbb{Q} es simétrico, al separar $\widehat{\mathbb{L}}$ en una parte simétrica en sus últimos dos índices $\widehat{\mathbb{L}}_{mnl}^{(S)}$ (los índices subrayados indican simetría en dichos índices) y otra antisimétrica $\widehat{\mathbb{L}}_{mnl}^{(A)}$ en dichos índices, se tiene que

$$(\widehat{\mathbb{L}}_{ik})_{mnl}(\mathbb{Q}_k)_{nl} = (\widehat{\mathbb{L}}_{ik}^{(S)})_{mnl}(\mathbb{Q}_k)_{nl} + (\widehat{\mathbb{L}}_{ik}^{(A)})_{mnl}(\mathbb{Q}_k)_{nl} = (\widehat{\mathbb{L}}_{ik}^{(S)})_{mnl}(\mathbb{Q}_k)_{nl}$$

La contracción de un tensor antisimétrico con uno simétrico se anula; se concluye que la parte antisimétrica es irrelevante. Se intenta entonces la siguiente expresión para $\widehat{\mathbb{L}}$

$$(\widehat{\mathbb{L}}_{ik})_{npq} = \mu\hat{R}_n\hat{R}_p\hat{R}_q + \nu\hat{R}_n\delta_{pq} + \lambda[\hat{R}_q\delta_{np} + \hat{R}_p\delta_{nq}] \quad (2.48)$$

Esta expresión cumple con ser una combinación lineal general. Luego se procede a calcular $(\widehat{\mathbb{L}}_{ik})_{npq}(\mathbb{Q}_k)_{pq}$, obteniéndose

$$\widehat{\mathbb{L}}\mathbb{Q} = \begin{bmatrix} (-\mu + 2\lambda)\cos(\theta) + \mu 2\cos^3(\theta) & \mu 2\sin(\theta)\cos^2(\theta) + 2\lambda\sin(\theta) \\ (-\mu - 2\lambda)\sin(\theta) + \mu 2\sin(\theta)\cos(\theta) & (2\mu + 2\lambda)\cos(\theta) - \mu 2\cos^3(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

Comparando este resultado con la expresión en (2.46) se obtiene que para los valores $\mu = -2$ y $\lambda = 1/2$ ambas expresiones son iguales. El valor de ν es irrelevante, pues ya que \mathbb{Q} tiene traza nula, el término que acompaña a ν en (2.48) se anula al reemplazar en (2.47). En efecto, pues

$$\delta_{pq}\mathbb{Q}_{pq} = \mathbb{Q}_{pp} \iff \sum_{p=1}^2 \mathbb{Q}_{pp} = 0$$

Por lo tanto, se puede elegir $\nu = 1/2$ para así obtener la siguiente expresión

$$(\mathbb{L}_{ik})_{npq} = \left(\frac{a_k}{R_{ik}}\right)^3 \widehat{\mathbb{L}}_{ik} = \left(\frac{a_k}{R_{ik}}\right)^3 \left\{ \frac{1}{2}(\hat{R}_n\delta_{pq} + \hat{R}_p\delta_{qn} + \hat{R}_q\delta_{np}) - 2\hat{R}_n\hat{R}_p\hat{R}_q \right\} \quad (2.50)$$

Una observación interesante es que $\mathbb{L}_{ik} = \mathbb{L}(\vec{R}_{ik})$ es impar en \hat{R}_{ik} , es decir, $\mathbb{L}_{ik} = -\mathbb{L}_{ki}$.

Se debe realizar el mismo cálculo para α_2^i y β_2^i .

- Cálculo de α_2^i

Para calcular (2.28) se usa que

$$\int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \cos(2\phi_i + 2\psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} = \frac{\pi a_i (1 - 2 \cos^2(\psi_{ik}))}{D_{ik}^2} \quad (2.51)$$

Modificando esta expresión,

$$\begin{aligned} \frac{\pi a_i (1 - 2 \cos^2(\psi_{ik}))}{D_{ik}^2} &= \frac{\pi a_i (D_{ik}^2 - 2D_{ik}^2 \cos^2(\psi_{ik}))}{D_{ik}^4} \\ &= \frac{\pi a_i (\|\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}\|^2 - 2[(\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}) \cdot \hat{x}]^2)}{\|\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}\|^4} \\ &= \frac{\pi a_i (a_k^2 + R_{ik}^2 - 2a_k R_{ik} \cos(\phi_k - \theta) - 2[a_k \cos(\phi_k) - R_{ik} \cos(\theta)]^2)}{(a_k^2 + R_{ik}^2 - 2a_k R_{ik} \cos(\phi_k - \theta))^2} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Utilizando esto en (2.28),

$$\begin{aligned} \alpha_2^i &= -\frac{1}{\pi^2} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \} \times \\ &\quad \left(\frac{\pi a_i (a_k^2 + R_{ik}^2 - 2a_k R_{ik} \cos(\phi_k - \theta) - 2[a_k \cos(\phi_k) - R_{ik} \cos(\theta)]^2)}{(a_k^2 + R_{ik}^2 - 2a_k R_{ik} \cos(\phi_k - \theta))^2} \right) \\ \alpha_2^i &= a_i \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left\{ \frac{a_k^2}{R_{ik}^3} \left[\alpha_1^k (-6 \cos(\theta) + 8 \cos^3(\theta)) + \beta_1^k (-2 \sin(\theta) + 8 \sin(\theta) \cos^2(\theta)) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{a_k^3}{R_{ik}^4} \left[\alpha_2^k (3 - 24 \cos^2(\theta) + 24 \cos^4(\theta)) + \beta_2^k (-12 \sin(\theta) \cos(\theta) + 24 \sin(\theta) \cos^3(\theta)) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.53)$$

- Cálculo de β_2^i

La integral que aparece en (2.29) es

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \sin(2\phi_i + 2\psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} &= -\frac{2\pi a_i \sin(\psi_{ik}) \cos(\psi_{ik})}{D_{ik}^2} \\ &= -\frac{2\pi a_i D_{ik} \sin(\psi_{ik}) D_{ik} \cos(\psi_{ik})}{D_{ik}^4} \\ &= -\frac{2\pi a_i (\vec{D}_{ik} \cdot \hat{y})(\vec{D}_{ik} \cdot \hat{x})}{D_{ik}^4} \end{aligned} \quad (2.54)$$

Con esto la ecuación (2.29) se puede escribir como

$$\begin{aligned}
\beta_2^i &= -\frac{1}{\pi^2} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \left\{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \right\} \frac{(-2\pi a_i)(\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}) \cdot \hat{y} (\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}) \cdot \hat{x}}{\|\vec{n}_k - \vec{R}_{ik}\|^4} \\
\beta_2^i &= -\frac{1}{\pi^2} (-2\pi a_i) \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \left\{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \right\} \times \\
&\quad \left(\frac{(a_k \sin(\phi_k) - R_{ik} \sin(\theta))(a_k \cos(\phi_k) - R_{ik} \cos(\theta))}{(a_k^2 + R_{ik}^2 - 2a_k R_{ik} \cos(\phi_k - \theta))^2} \right) \\
\beta_2^i &= a_i \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left\{ \frac{a_k^2}{R_{ik}^3} \left[\alpha_1^k (-2 \sin(\theta) + 8 \sin(\theta) \cos^2(\theta)) + \beta_1^k (6 \cos(\theta) - 8 \cos^3(\theta)) \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{a_k^3}{R_{ik}^4} \left[\alpha_2^k (-12 \sin(\theta) \cos(\theta) + 24 \sin(\theta) \cos^3(\theta)) + \beta_2^k (-3 + 24 \cos^2(\theta) - 24 \cos^4(\theta)) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{2.55}$$

Los dos resultados (2.53) y (2.55) se pueden escribir de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \alpha_2^i \\ \beta_2^i \end{bmatrix} &= a_i \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left\{ \frac{a_k^2}{R_{ik}^3} \begin{bmatrix} -6 \cos(\theta) + 8 \cos^3(\theta) & -2 \sin(\theta) + 8 \sin(\theta) \cos^2(\theta) \\ -2 \sin(\theta) + 8 \sin(\theta) \cos^2(\theta) & 6 \cos(\theta) - 8 \cos^3(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^k \\ \beta_1^k \end{bmatrix} \right. \\
&\quad \left. + \frac{a_k^3}{R_{ik}^4} \begin{bmatrix} 3 - 24 \cos^2(\theta) + 24 \cos^4(\theta) & -12 \sin(\theta) \cos(\theta) + 24 \sin(\theta) \cos^3(\theta) \\ -12 \sin(\theta) \cos(\theta) + 24 \sin(\theta) \cos^3(\theta) & -3 + 24 \cos^2(\theta) - 24 \cos^4(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_2^k \\ \beta_2^k \end{bmatrix} \right\}
\end{aligned} \tag{2.56}$$

El lado izquierdo de esta ecuación podría interpretarse como un segundo “vector dipolar” formado por los coeficientes α_2 y β_2 ; sin embargo, estos coeficientes no forman un vector pues tensorialmente no rotan como un vector, sino que están asociados al tensor cuadrupolar Q . Por lo tanto, resulta más apropiado escribir (2.56) de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \alpha_2^i & \beta_2^i \\ \beta_2^i & -\alpha_2^i \end{bmatrix} &= \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{a_i a_k^2}{R_{ik}^3} \left\{ \begin{bmatrix} (-6 \cos(\theta) + 8 \cos^3(\theta)) \alpha_1^k + (-2 \sin(\theta) + 8 \sin(\theta) \cos^2(\theta)) \beta_1^k \\ (-2 \sin(\theta) + 8 \sin(\theta) \cos^2(\theta)) \alpha_1^k + (6 \cos(\theta) - 8 \cos^3(\theta)) \beta_1^k \end{bmatrix} \right. \\
&\quad \left. \begin{bmatrix} (-2 \sin(\theta) + 8 \sin(\theta) \cos^2(\theta)) \alpha_1^k + (6 \cos(\theta) - 8 \cos^3(\theta)) \beta_1^k \\ (6 \cos(\theta) - 8 \cos^3(\theta)) \alpha_1^k + (2 \sin(\theta) - 8 \sin(\theta) \cos^2(\theta)) \beta_1^k \end{bmatrix} \right\} \\
&\quad + \frac{a_i a_k^3}{R_{ik}^4} \left\{ \begin{bmatrix} (3 - 24 \cos^2(\theta) + 24 \cos^4(\theta)) \alpha_2^k + (-12 \sin(\theta) \cos(\theta) + 24 \sin(\theta) \cos^3(\theta)) \beta_2^k \\ (-12 \sin(\theta) \cos(\theta) + 24 \sin(\theta) \cos^3(\theta)) \alpha_2^k + (-3 + 24 \cos^2(\theta) - 24 \cos^4(\theta)) \beta_2^k \\ (-12 \sin(\theta) \cos(\theta) + 24 \sin(\theta) \cos^3(\theta)) \alpha_2^k + (-3 + 24 \cos^2(\theta) - 24 \cos^4(\theta)) \beta_2^k \\ (-3 + 24 \cos^2(\theta) - 24 \cos^4(\theta)) \alpha_2^k + (12 \sin(\theta) \cos(\theta) - 24 \sin(\theta) \cos^3(\theta)) \beta_2^k \end{bmatrix} \right\}
\end{aligned}$$

(2.57)

Ecuación que se puede representar de la siguiente forma

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \mathbb{M}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{N}_{ik} \mathbf{Q}_k \quad (2.58)$$

En forma similar a lo hecho para los tensores \mathbb{L} y \mathbb{K} , se procede a utilizar la siguiente adivinanza para $\widehat{\mathbb{M}}_{ik}$, con $\mathbb{M}_{ik} \equiv (a_i a_k^2 / R_{ik}^3) \widehat{\mathbb{M}}_{ik}$

$$(\widehat{\mathbb{M}})_{pql} = \mu(\hat{R}_p \hat{R}_q \hat{R}_l) + \nu \delta_{pq} \hat{R}_l + \lambda[\delta_{ql} \hat{R}_p + \delta_{pl} \hat{R}_q] \quad (2.59)$$

Como se puede apreciar, se ha elegido una expresión simétrica en los dos primeros índices p, q , dado que \mathbf{Q} es simétrico en dichos índices. Se calcula entonces $\widehat{\mathbb{M}}_{pql} \vec{d}_l$ y se compara con el primer tensor del lado derecho de la ecuación (2.57). La igualdad entre ambos se cumple para los valores $\mu = 8$, $\nu = -2$ y $\lambda = -2$.

Se obtiene, por lo tanto,

$$(\mathbb{M})_{pql} = \frac{a_i a_k^2}{R_{ik}^3} (8 \hat{R}_p \hat{R}_q \hat{R}_l - 2[\delta_{pq} \hat{R}_l + \delta_{ql} \hat{R}_p + \delta_{pl} \hat{R}_q]) \quad (2.60)$$

Se observa que⁴

$$\begin{aligned} (\mathbb{M})_{ppl} &= \frac{a_i a_k^2}{R_{ik}^3} \left(8 \overbrace{\hat{R}_p \hat{R}_p}^{=1} \hat{R}_l - 2[\overbrace{\delta_{pp}}^{=2} \hat{R}_l + \delta_{lp} \hat{R}_p + \delta_{pl} \hat{R}_p] \right) \\ &= \frac{a_i a_k^2}{R_{ik}^3} (8 \hat{R}_l - 2[2 \hat{R}_l + \hat{R}_l + \hat{R}_l]) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.61)$$

Se ha de calcular $\mathbb{N}\mathbf{Q}$. Definiendo $\widehat{\mathbb{N}}_{ik}$ tal que $\mathbb{N}_{ik} = (a_i a_k^3 / R_{ik}^4) \widehat{\mathbb{N}}_{ik}$, se procede a usar la siguiente adivinanza

$$(\widehat{\mathbb{N}}_{ik})_{pqln} = \mu \hat{R}_p \hat{R}_q \hat{R}_l \hat{R}_n + \nu \delta_{pq} \hat{R}_l \hat{R}_n + \lambda [(\delta_{lp} \hat{R}_q + \delta_{ql} \hat{R}_p) \hat{R}_n + (\delta_{np} \hat{R}_q + \delta_{qn} \hat{R}_p) \hat{R}_l] \quad (2.62)$$

Nuevamente se ha elegido una expresión simétrica en los dos primeros índices. Se procede a utilizar la adivinanza para calcular $\widehat{\mathbb{N}}_{pqln} \mathbf{Q}_n$ y se compara con el segundo tensor al lado derecho de la ecuación (2.57). Se cumple la igualdad en este caso para los valores $\mu = 12$, $\nu = -3$, $\lambda = -3/2$.

⁴Notar que, como se trabaja en dos dimensiones, $\delta_{pp} = \sum_{p=1}^2 \delta_{pp} = 2$.

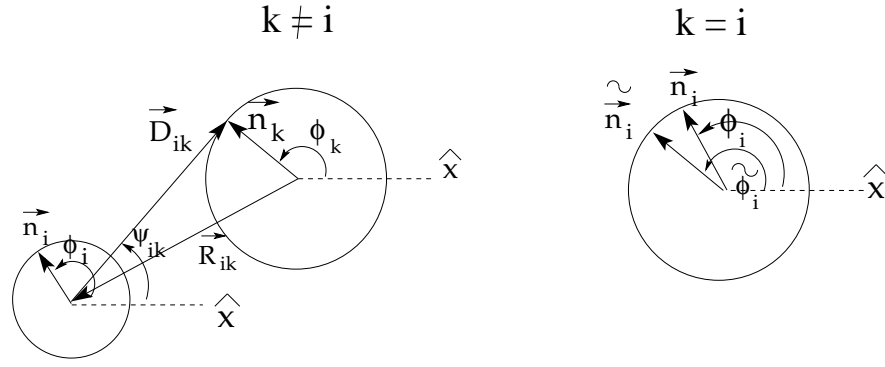


Figura 2.5: Diferencia entre los casos $k \neq i$ y $k = i$. Figura de la izquierda: caso $k \neq i$. Figura de la derecha: caso $k = i$, en la que, por claridad, se han redefinido ciertas cantidades involucradas en los cálculos.

$$\mathbb{N}_{pqln}(\vec{R}) = \frac{a_i a_k^3}{R^4} \left\{ 12\hat{R}_p \hat{R}_q \hat{R}_l \hat{R}_n - 3\delta_{pq} \hat{R}_l \hat{R}_n - \frac{3}{2} \left[(\delta_{lp} \hat{R}_q + \delta_{ql} \hat{R}_p) \hat{R}_n + (\delta_{np} \hat{R}_q + \delta_{qn} \hat{R}_p) \hat{R}_l \right] \right\} \quad (2.63)$$

De manera similar a la propiedad de \mathbb{M} que aparece en (2.61), se cumple que $(\mathbb{N})_{ppln} = 0$.

Se ha de recordar que todos estos resultados fueron para $k \neq i$; es necesario entonces calcular el aporte de las integrales que aparecen en (2.26) a (2.29) para $k = i$.

Como un breve recordatorio, se tiene que

$$\alpha_1^i = -\frac{1}{\pi^2} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \left\{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \dots + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \right\} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - D_{ik} \cos(\phi_i)) \cos(\phi_i + \psi_{ik})}{(a_i^2 + D_{ik}^2 - 2a_i D_{ik} \cos(\phi_i))} + \frac{2\eta}{\pi H^2} \tilde{U}_i \quad (2.64)$$

donde $\vec{D}_{ik} = \vec{n}_k - \vec{R}_{ik}$ y ψ_{ik} es el ángulo que forma este vector con el eje x (el cual se eligió según el vector \vec{U}_i ; ver figura 2.5). ϕ_i y ϕ_k son los ángulos que forman los vectores \vec{n}_i y \vec{n}_k con el eje x , respectivamente. Sin embargo, para el caso $k = i$ ambos ángulos se ubican en la misma circunferencia pero *no* corresponden a un mismo ángulo.

Además se tiene que para $k = i$, $\vec{R}_{ik} = \vec{R}_i - \vec{R}_k = 0$, por lo que \vec{D}_{ik} pasaría también a ser un vector normal a la superficie como lo es \vec{n}_i , pero *no* el mismo vector. Tomando en cuenta estas consideraciones se procederá a renombrar a las variables para este caso particular de $k = i$ de modo de evitar confusiones.

$$\vec{D}_{ik} \rightarrow \tilde{n}_i \quad ; \quad \|\vec{D}_{ik}\| = \|\tilde{n}_i\| = a_i$$

como el ángulo que forma \tilde{n}_i es $\tilde{\phi}_i$,

$$\psi_{ik} \rightarrow \tilde{\phi}_i$$

Con esto, la ecuación (2.64) para el caso $k = i$ se puede reescribir como

$$\alpha_1^i \rightarrow -\frac{1}{\pi^2} a_i \int_0^{2\pi} d\tilde{\phi}_i \{ \alpha_1^i \cos(\tilde{\phi}_i) + \dots + \beta_2^i \sin(2\tilde{\phi}_i) \} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - a_i \cos(\phi_i)) \cos(\phi_i + \tilde{\phi}_i)}{(a_i^2 + a_i^2 - 2a_i^2 \cos(\phi_i))} \quad (2.65)$$

Sin embargo,

$$\int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - a_i \cos(\phi_i)) \cos(\phi_i + \tilde{\phi}_i)}{(a_i^2 + a_i^2 - 2a_i^2 \cos(\phi_i))} = 0$$

Por lo tanto no hay aporte para α_1^i en el caso $k = i$. Para los demás coeficientes,

$$\begin{aligned} \text{Para } \beta_1^i &\rightarrow -\frac{1}{\pi^2} a_i \int_0^{2\pi} d\tilde{\phi}_i \{ \alpha_1^i \cos(\tilde{\phi}_i) + \dots + \beta_2^i \sin(2\tilde{\phi}_i) \} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - a_i \cos(\phi_i)) \sin(\phi_i + \tilde{\phi}_i)}{(2a_i^2 - 2a_i^2 \cos(\phi_i))} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.66)$$

Tampoco hay aporte de β_1^i .

$$\begin{aligned} \text{Para } \alpha_2^i &\rightarrow -\frac{1}{\pi^2} a_i \int_0^{2\pi} d\tilde{\phi}_i \{ \alpha_1^i \cos(\tilde{\phi}_i) + \dots + \beta_2^i \sin(2\tilde{\phi}_i) \} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - a_i \cos(\phi_i)) \cos(2\phi_i + 2\tilde{\phi}_i)}{(2a_i^2 - 2a_i^2 \cos(\phi_i))} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} \text{Para } \beta_2^i &\rightarrow -\frac{1}{\pi^2} a_i \int_0^{2\pi} d\tilde{\phi}_i \{ \alpha_1^i \cos(\tilde{\phi}_i) + \dots + \beta_2^i \sin(2\tilde{\phi}_i) \} \int_0^{2\pi} d\phi_i \frac{(a_i - a_i \cos(\phi_i)) \sin(2\phi_i + 2\tilde{\phi}_i)}{(2a_i^2 - 2a_i^2 \cos(\phi_i))} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.68)$$

Se concluye que el caso $k = i$ no aporta en los coeficientes. Como conclusión, se ha obtenido el siguiente modelo cuadrupolar,

$$\begin{aligned} \omega_i(\vec{r}_i) &= \vec{d}_i \cdot \hat{n}_i + \hat{n}_i \cdot \mathbf{Q}_i \cdot \hat{n}_i \quad (2.69) \\ \vec{d}_i &= \sum_{k \neq i} (\mathbf{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbf{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \\ \mathbf{Q}_i &= \sum_{k \neq i} (\mathbf{M}_{ik} \vec{d}_k + \mathbf{N}_{ik} \mathbf{Q}_k) \end{aligned}$$

En la ecuación para \vec{d}_i se ha usado la definición $\vec{U}_i = (3/2)\vec{U}_i$ para escribir la ecuación en función de la verdadera velocidad \vec{U}_i de la partícula i . Las expresiones para los tensores que aparecen en (2.69) son

$$\begin{aligned}
(\mathbb{K}_{ik})_{np} &= \frac{a_k^2}{R_{ik}^2} \left\{ \delta_{np} - 2\hat{R}_n \hat{R}_p \right\} \\
(\mathbb{L}_{ik})_{npq} &= \frac{a_k^3}{R_{ik}^3} \left\{ \frac{1}{2} (\hat{R}_n \delta_{pq} + \hat{R}_p \delta_{qn} + \hat{R}_q \delta_{np}) - 2\hat{R}_n \hat{R}_p \hat{R}_q \right\} \\
(\mathbb{M}_{ik})_{pql} &= \frac{a_i a_k^2}{R_{ik}^3} \left\{ 8\hat{R}_p \hat{R}_q \hat{R}_l - 2[\delta_{pq} \hat{R}_l + \delta_{ql} \hat{R}_p + \delta_{pl} \hat{R}_q] \right\} \\
(\mathbb{N}_{ik})_{pqln} &= \frac{a_i a_k^3}{R_{ik}^4} \left\{ 12\hat{R}_p \hat{R}_q \hat{R}_l \hat{R}_n - 3\delta_{pq} \hat{R}_l \hat{R}_n - \frac{3}{2} \left[(\delta_{lp} \hat{R}_q + \delta_{ql} \hat{R}_p) \hat{R}_n + (\delta_{np} \hat{R}_q + \delta_{qn} \hat{R}_p) \hat{R}_l \right] \right\}
\end{aligned} \tag{2.70}$$

Se recuerda que \hat{R} corresponde al vector unitario asociado al vector \vec{R}_{ik} . Ahora se puede explicar mejor porqué se espera que la expansión cuadrupolar en (2.23) sea una aproximación suficiente para la serie de Fourier completa. De las ecuaciones en (2.70) se puede apreciar que \mathbb{N} decae más rápido que \mathbb{M} y \mathbb{L} , y éstos a su vez decaen más rápido que \mathbb{K} ; por lo tanto, si se desea recuperar los aportes principales que logran describir la dinámica correcta, ya al considerar a \mathbb{N} se toma en cuenta un término que decae bastante rápido. Luego, si los siguientes términos de la expansión cumplieren la propiedad de decaer aún más rápido (suposición que se basa en el decaimiento que cumplen $\mathbb{K}, \mathbb{L}, \mathbb{M}$ y \mathbb{N}), estos siguientes términos corresponderían a correcciones que serán despreciadas.

2.3. Deducción de la dinámica

Dado que ya se posee el modelo cuadrupolar, se puede calcular la presión

$$p(\vec{r}) = - \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \omega_k(\phi_k) \ln(\|\vec{r} - \vec{r}_k\|) d\phi_k \tag{2.71}$$

Usando la aproximación del modelo cuadrupolar para ω que aparece en (2.23),

$$p(\vec{r}) \simeq - \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \{ \alpha_1^k \cos(\phi_k) + \beta_1^k \sin(\phi_k) + \alpha_2^k \cos(2\phi_k) + \beta_2^k \sin(2\phi_k) \} \ln(\|\vec{r} - \vec{r}_k\|) d\phi_k \tag{2.72}$$

Para calcular esta integral, es conveniente primero integrar por partes.

$$p(\vec{r}) = + \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \{ \alpha_1^k \sin(\phi_k) - \beta_1^k \cos(\phi_k) + \frac{\alpha_2^k}{2} \sin(2\phi_k) - \frac{\beta_2^k}{2} \cos(2\phi_k) \} \frac{\partial \ln(\|\vec{r} - \vec{r}_k\|)}{\partial \phi_k} d\phi_k \tag{2.73}$$

Escribiendo $\vec{r}_k = \vec{R}_k + a_k \hat{n}_k = \vec{R}_k + \vec{n}_k = \vec{R}_k + a_k \cos(\phi_k) \hat{x} + a_k \sin(\phi_k) \hat{y}$ (ver figura 2.6), se tiene que

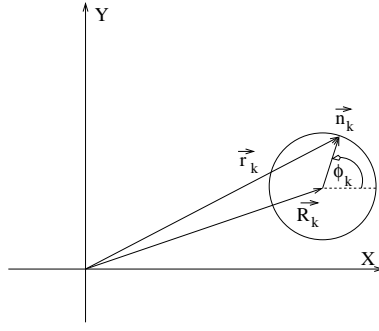


Figura 2.6: Se recuerdan los vectores involucrados en los cálculos. \vec{R}_k apunta hacia el centro de la partícula k , \vec{r}_k a su superficie y \vec{n}_k va desde \vec{R}_k hasta \vec{r}_k . ϕ_k es el ángulo entre el eje \hat{x} y \vec{n}_k .

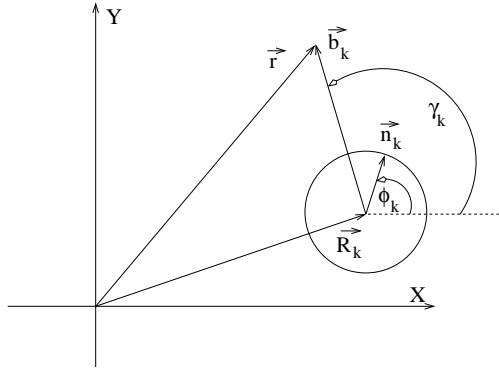


Figura 2.7: El nuevo vector introducido en el cálculo \vec{b}_k apunta desde el centro de la partícula k hacia el punto \vec{r} en donde se desea evaluar la presión. γ_k es el ángulo entre \hat{x} y \vec{b}_k .

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \ln(\|\vec{r} - \vec{r}_k\|)}{\partial \phi_k} &= \frac{(\vec{r} - \vec{r}_k)}{\|\vec{r} - \vec{r}_k\|^2} \cdot \left(-\frac{\partial \vec{r}_k}{\partial \phi_k} \right) \\
 &= \frac{-(\vec{r} - \vec{r}_k)}{\|\vec{r} - \vec{r}_k\|^2} \cdot \{-a_k \sin(\phi_k) \hat{x} + a_k \cos(\phi_k) \hat{y}\} \\
 &= \frac{-(\vec{r} - \vec{r}_k)}{\|\vec{r} - \vec{r}_k\|^2} \cdot \{\hat{z} \times \hat{n}_k\}
 \end{aligned} \tag{2.74}$$

Resulta conveniente definir $\vec{b}_k \equiv \vec{r} - \vec{R}_k$, con lo que $\vec{r} - \vec{r}_k = \vec{r} - \vec{R}_k - \vec{n}_k = \vec{b}_k - \vec{n}_k$ (ver figura 2.7). De esta manera se tiene que

$$(\vec{r} - \vec{r}_k) \cdot (\hat{z} \times \hat{n}_k) = \vec{b}_k \cdot (\hat{z} \times \hat{n}_k) - \underbrace{\vec{n}_k \cdot (\hat{z} \times \hat{n}_k)}_{=0} = \vec{b}_k \cdot (-a_k \sin(\phi_k) \hat{x} + a_k \cos(\phi_k) \hat{y}) \tag{2.75}$$

Si se define el ángulo γ_k tal que $\vec{b}_k \cdot \hat{x} = b_k \cos(\gamma_k)$ y $\vec{b}_k \cdot \hat{y} = b_k \sin(\gamma_k)$ (ver figura 2.7), al usar los resultados (2.74), (2.75) y la definición de γ , se obtiene que

$$p(\vec{r}) = -\sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \left\{ \alpha_1^k \sin(\phi_k) - \beta_1^k \cos(\phi_k) + \frac{\alpha_2^k}{2} \sin(2\phi_k) - \frac{\beta_2^k}{2} \cos(2\phi_k) \right\} \times$$

$$\left(\frac{-a_k b_k \sin(\phi_k) \cos(\gamma_k) + a_k b_k \cos(\phi_k) \sin(\gamma_k)}{a_k^2 + b_k^2 - 2a_k b_k \cos(\gamma_k - \phi_k)} d\phi_k \right)$$

Calculando la integral y usando las definiciones de \vec{d} y \mathbf{Q} que aparecen en (2.40) junto con la definición de \vec{b} , se encuentra finalmente la expresión para la presión del fluido.

$$p(\vec{r}) = \sum_{k=1}^N \frac{\pi a_k^2}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^2} (\vec{d}_k \cdot [\vec{r} - \vec{R}_k]) + \frac{\pi a_k^3}{2\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} (\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k) \quad (2.76)$$

En la figura 2.8 aparece una representación esquemática de la forma que tiene la presión del fluido alrededor de una partícula de prueba. Si uno graficase las líneas de igual presión, éstas serían consistentes con los lóbulos aquí dibujados. Conviene mencionar que más adelante se mostrará que el vector dipolar de una partícula es, en una primera aproximación, igual a su velocidad. Por lo tanto, los lóbulos de presión son equivalentes al de una partícula que se mueve con velocidad constante.

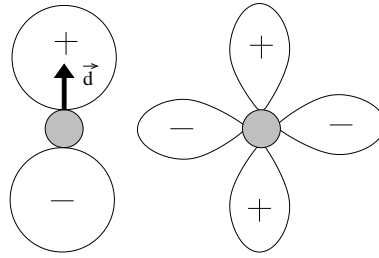


Figura 2.8: Representación esquemática de los lóbulos de presión generados por un campo dipolar (izquierda) y cuadrupolar (derecha). En las zonas con un signo '+' hay una mayor presión, mientras que en donde hay un '-' hay menor presión.

El siguiente paso es calcular la velocidad del fluido de acuerdo a la ecuación

$$\vec{v}(x, y, z) = -G(z) \frac{H^2}{2\eta} \nabla_{//} p \quad (2.77)$$

con

$$G(z) \equiv 1 - \frac{z^2}{H^2}$$

Al realizar el cálculo se obtiene

$$\vec{v}(x, y, z) = -G(z) \frac{H^2}{2\eta} \sum_{k=1}^N \left[\pi a_k^2 \left\{ \frac{\vec{d}_k}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^2} - 2 \frac{\vec{d}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} (\vec{r} - \vec{R}_k) \right\} \right.$$

$$\left. + \pi a_k^3 \left\{ \frac{\mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} - 2 \frac{(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^6} (\vec{r} - \vec{R}_k) \right\} \right] \quad (2.78)$$

De manera similar a lo realizado para la presión, en la figura 2.9 aparece una representación esquemática del campo de velocidad del fluido obtenido en la ecuación (2.78). Este dibujo se puede deducir a partir de los lóbulos de presión dibujados en 2.8.

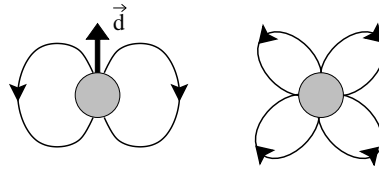


Figura 2.9: Para facilitar la interpretación del resultado (2.78), este dibujo representa en forma esquemática los campos de velocidad que generan un campo dipolar (figura izquierda) y un campo cuadrupolar (figura derecha). Notar que son consistentes con los lóbulos de presión.

Finalmente lo que uno desea calcular es la fuerza sobre el i -ésimo disco, de manera de poder develar la dinámica de cada una de las partículas de la suspensión. En orden de lograr esto es necesario calcular las componentes del *Tensor de Tensiones* \mathbb{P} .

2.3.1. Fuerzas

Tal como indica la Dra. Álvarez en su tesis [1], la fuerza hidrodinámica sobre una partícula es

$$\begin{aligned}\vec{F} &= - \oint_{\partial\Omega} \mathbb{P} \hat{n} dS \\ &= - \oint_{\partial\Omega} (p \hat{n} - \tau \cdot \hat{n}) dS\end{aligned}\quad (2.79)$$

τ es conocido como el *tensor de esfuerzo viscoso* o *Tensor de Reynolds*. El elemento de superficie vectorial $\hat{n}dS$ es normal a la superficie de la partícula, que en este caso es un disco. Si se trata del manto del disco, entonces (en coordenadas cilíndricas (ρ, ϕ, z) centradas en el disco) se tiene que $\hat{n} = \hat{\rho}$ y

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_\rho &= p - \tau_{\rho\rho} \\ \mathbb{P}_\phi &= -\tau_{\phi\rho} \\ \mathbb{P}_z &= -\tau_{z\rho}\end{aligned}\quad (2.80)$$

Si la normal a la superficie apunta en la dirección del eje z , el tensor τ en la superficie es

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_\rho &= -\tau_{\rho z} \\ \mathbb{P}_\phi &= -\tau_{\phi z} \\ \mathbb{P}_z &= p - \tau_{zz}\end{aligned}\quad (2.81)$$

donde

$$\begin{aligned}
\tau_{\phi z} &= \eta \left(\frac{1}{2\rho} \frac{\partial v_z}{\partial \phi} + \frac{1}{2} \frac{\partial v_\phi}{\partial z} \right) \\
\tau_{z\rho} &= \eta \left(\frac{1}{2} \frac{\partial v_\rho}{\partial z} + \frac{1}{2\rho} \frac{\partial v_z}{\partial \rho} \right) \\
\tau_{\rho\rho} &= \eta \frac{\partial v_\rho}{\partial \rho} \\
\tau_{\rho\phi} &= \eta \left(\frac{\rho}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{v_\phi}{\rho} \right) + \frac{1}{2\rho} \frac{\partial v_\rho}{\partial \phi} \right) \\
\tau_{\phi\phi} &= \eta \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_\rho}{\rho} \right)
\end{aligned} \tag{2.82}$$

Si se desean las proyecciones cartesianas de la fuerza \vec{F} sobre el disco, se pueden usar las fórmulas

$$\begin{aligned}
F_x &= - \oint (\mathbb{P}_\rho \cos(\phi) + \mathbb{P}_\phi \sin(\phi)) dS \\
F_y &= - \oint (\mathbb{P}_\rho \sin(\phi) - \mathbb{P}_\phi \cos(\phi)) dS \\
F_z &= - \oint \mathbb{P}_z dS
\end{aligned} \tag{2.83}$$

Para calcular las componentes de τ se han de manipular un poco las expresiones que se tienen. Por ejemplo,

$$\frac{\partial v_\rho}{\partial \rho} = \frac{\partial(\vec{v} \cdot \hat{\rho})}{\partial \rho} = \hat{\rho} \cdot \frac{\partial \vec{v}}{\partial \rho} = \hat{\rho} \cdot \frac{\partial \vec{v}}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial \rho} \tag{2.84}$$

Es más simple calcular esta expresión con notación tensorial, denominando $\hat{\rho}_\alpha$ a la componente α de $\hat{\rho}$. Se procede a escribir $\vec{r} = \vec{R} + \rho \hat{\rho}$, con \vec{R} un vector que apunta hacia el centro del disco sobre el cual se desea calcular la fuerza. Luego, la expresión en (2.84) queda

$$\frac{\partial v_\rho}{\partial \rho} = \hat{\rho}_\alpha \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial x_\beta}{\partial \rho} = \hat{\rho}_\alpha \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial (R_\beta + \rho \hat{\rho}_\beta)}{\partial \rho} = \hat{\rho}_\alpha \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial x_\beta} \hat{\rho}_\beta \tag{2.85}$$

Se puede calcular más fácilmente $\tau_{\rho\rho}$; suponiendo que se desea calcular la fuerza sobre el disco i , entonces $\hat{\rho} = \hat{\rho}_i$. Luego,

$$\tau_{\rho\rho} = \eta \frac{\partial v_\rho}{\partial \rho} = \eta (\hat{\rho}_i)_\alpha \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial x_\beta} (\hat{\rho}_i)_\beta \tag{2.86}$$

Al realizar este cálculo, el resultado obtenido (en notación vectorial) es

$$\begin{aligned}
\tau_{\rho\rho} = & -\frac{GH^2}{2} \sum_{k=1}^N \left[\pi a_k^2 \left\{ -4 \frac{(\vec{d}_k \cdot \hat{\rho}_i)(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\rho}_i}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} + 8 \frac{(\vec{d}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k))(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\rho}_i^2}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^6} - 2 \frac{\vec{d}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} \right\} \right. \\
& + \pi a_k^3 \left\{ \frac{\hat{\rho}_i \cdot \mathbf{Q}_k \cdot \hat{\rho}_i}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} - 8 \frac{(\hat{\rho}_i \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k))(\hat{\rho}_i \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k))}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^6} + 12 \frac{((\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k))(\hat{\rho}_i \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k))^2}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^8} \right. \\
& \left. \left. - 2 \frac{(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^6} \right\} \right] \quad (2.87)
\end{aligned}$$

Para $\tau_{\rho\phi}$ se tiene que

$$\frac{\partial v_\phi}{\partial \rho} = \frac{\partial(\vec{v} \cdot \hat{\phi})}{\partial \rho} = \hat{\phi} \cdot \frac{\partial \vec{v}}{\partial \rho} = \hat{\phi}_\alpha \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial x_\beta}{\partial \rho} = \hat{\phi}_\alpha \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \hat{\rho}_\beta \quad (2.88)$$

Además,

$$\frac{\partial v_\rho}{\partial \phi} = \frac{\partial(\vec{v} \cdot \hat{\rho})}{\partial \phi} = \vec{v} \cdot \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \phi} + \hat{\rho} \cdot \frac{\partial \vec{v}}{\partial \phi} \quad (2.89)$$

Si además se considera que

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \phi} = \frac{\partial(\cos(\phi)\hat{x} + \sin(\phi)\hat{y})}{\partial \phi} = -\sin(\phi)\hat{x} + \cos(\phi)\hat{y} = \hat{\phi}$$

entonces

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \phi} + \hat{\rho} \cdot \frac{\partial \vec{v}}{\partial \phi} = \vec{v} \cdot \hat{\phi} + \hat{\rho}_\alpha \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial x_\beta}{\partial \phi} = v_\phi + \hat{\rho}_\alpha \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial(R_\beta + \rho \hat{\rho}_\beta)}{\partial \phi} = v_\phi + \hat{\rho}_\alpha \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} (\rho \hat{\phi}_\beta) \quad (2.90)$$

Se pueden usar estos resultados para calcular $\tau_{\rho\phi}$. Nuevamente se analiza para el disco i , por lo que se usará $\hat{\phi}_i$ y $\hat{\rho}_i$. Se recuerda que

$$\tau_{\rho\phi} = \eta \left(\frac{\rho}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{v_\phi}{\rho} \right) + \frac{1}{2\rho} \frac{\partial v_\rho}{\partial \phi} \right)$$

Expresión que se puede reescribir como

$$\tau_{\rho\phi} = \eta (\hat{\phi}_i)_\alpha \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} (\hat{\rho}_i)_\beta \quad (2.91)$$

Este cálculo entrega

$$\begin{aligned}
\tau_{\rho\phi} = & -\frac{GH^2}{2} \sum_{k=1}^N \left[\pi a_k^2 \left\{ -2 \frac{[(\vec{d}_k \cdot \hat{\phi}_i)(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\rho}_i] + (\vec{d}_k \cdot \hat{\rho}_i)(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\phi}_i}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} \right. \right. \\
& + \left. \left. 8 \frac{(\vec{d}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k))(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\phi}_i(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\rho}_i}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^6} \right\} \right. \\
& + \pi a_k^3 \left\{ \frac{\hat{\phi}_i \cdot \mathbf{Q}_k \cdot \hat{\rho}_i}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} - 4 \frac{([\hat{\phi}_i \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)][(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\rho}_i] + [\hat{\rho}_i \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)][(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\phi}_i])}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^6} \right. \\
& \left. \left. + 12 \frac{[(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)][(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\phi}_i][(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \hat{\rho}_i]}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^8} \right\} \right] \quad (2.92)
\end{aligned}$$

Primero se comenzará calculando el aporte dado por el tensor de Reynolds a la fuerza. Se recuerda que las componentes de τ están evaluadas en la superficie del disco i , es decir, $\vec{r} = \vec{r}_i = \vec{R}_i + a_i \hat{\rho}_i$, y al calcular la integral cierto cuidado hay que tener para el caso $k = i$.

$$\vec{F}_i^{\text{Reynolds}} = \int_{-L/2}^{+L/2} \int_0^{2\pi} (\tau_{\rho\rho} \hat{\rho}_i + \tau_{\phi\rho} \hat{\phi}_i) a_i d\phi_i dz_i = 0$$

Es decir, al utilizar los resultados (2.87) y (2.92) para el cálculo de la integral, se obtiene que ésta se anula; por lo tanto, no hay aporte para la fuerza debido al tensor de Reynolds. Esto está de acuerdo con la teoría de Hele-Shaw que implica utilizar un sistema equivalente que tiene un fluido invíscido [3]. No se calculó la componente de la fuerza sobre las tapas del disco pues el modelo de Hele-Shaw no se puede aplicar para una zona en que la pared está tan cerca del disco; para ello es necesario hacer un análisis distinto, estudiando el flujo específico que se produce entre la pared y el disco. De todas maneras, se recuerda que el efecto de las paredes sobre la suspensión es simplemente el de acelerar la evolución del sistema hacia estado estacionario (esto se mencionó en la Introducción), por lo que no es relevante, considerando que se desea estudiar el comportamiento colectivo de una suspensión.

Sigue calcular el aporte dado por la presión del fluido sobre la partícula.

$$\begin{aligned} \vec{F}_i^{\text{Presión}} &= - \oint_{\partial\Omega} p \hat{n}_i dS_i \\ &= - \int_{-L/2}^{+L/2} \int_0^{2\pi} p (\cos(\phi_i) \hat{x} + \sin(\phi_i) \hat{y}) a_i d\phi_i dz_i \end{aligned} \quad (2.93)$$

Para el cálculo de esta integral se utiliza la expresión dada en (2.76) para la presión del fluido. Atención especial hay que dar al caso $k = i$. Esto se debe a que en la expresión para p aparece el término $\vec{r} - \vec{R}_k = \vec{R}_i + a_i \hat{\rho}_i - \vec{R}_k = \vec{R}_{ik} + a_i \hat{\rho}_i$, donde la primera igualdad ($\vec{r} = \vec{R}_i + a_i \hat{\rho}_i$) se debe a que hay que evaluar la presión sobre la superficie de la partícula a la cual se desea calcular la fuerza. El cuidado radica en que para el caso $k = i$, se tiene que $\vec{R}_{ik} = \vec{R}_i - \vec{R}_k = 0$.

Finalmente, se obtiene

$$\vec{F}_i = \underbrace{-(\pi a_i)^2 L \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \{ \mathbb{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k \}}_{\text{Aporte dado por } k \neq i} + \underbrace{\frac{-(\pi a_i)^2 L \vec{d}_i}_{\text{Aporte dado por } k=i}} \quad (2.94)$$

Una interesante interpretación se puede obtener al analizar esta fórmula. El aporte dado por el término $k = i$ corresponde a un *arrastre* del fluido sobre la partícula a medida que ésta sedimenta, y es causado por esta misma partícula. Una mejor interpretación se puede obtener si se analiza la expresión para el vector dipolar, dada en (2.69)

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbb{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i$$

Como se puede apreciar, el vector dipolar de una partícula está directamente relacionado con su velocidad; inclusive, en el límite de suspensiones muy diluidas (*i.e.*, sin interacciones, con $\mathbb{K} = \mathbb{L} = 0$) entonces $\vec{d} \propto \vec{U}$. Por lo tanto, de cierto modo se puede ver al vector \vec{d} como la velocidad de la

partícula (esto solamente con el fin de interpretar los resultados, pues claramente hay correcciones a esta “solución de orden cero” para el vector dipolar). Este aporte dado por $k = i$ sería una fuerza en el sentido opuesto a la velocidad, *i.e.*, puede interpretarse como el *roce viscoso* sobre la partícula.

Por otro lado, el aporte de los términos con $k \neq i$ son consecuencia de las interacciones hidrodinámicas entre la partícula estudiada y todas las demás del fluido, *i.e.*, cada una de las otras $N - 1$ partículas sedimentando ejerce su influencia sobre la partícula i . Como se puede observar de (2.94), las interacciones hidrodinámicas decaen como R^{-2} (dado por la dependencia en \mathbb{K}), un decaimiento más rápido que en tres dimensiones, que en cuyo caso decaen como R^{-1} .

Ya que el tensor \mathbb{L} decae más rápido que \mathbb{K} , se analizará el aporte de este último pues es más relevante en la dinámica del sistema. Luego, el aporte principal dado por los términos con $k \neq i$ corresponde a

$$\vec{F}_i^{\text{principal}} = -(\pi a_i)^2 L \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{d}_k \sim -(\pi a_i)^2 L \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{U}_k = -(\pi a_i)^2 L \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{a_k^2}{R_{ik}^2} \left(\vec{U}_k - 2 \frac{\vec{U}_k \cdot \vec{R}_{ik}}{R_{ik}^2} \vec{R}_{ik} \right) \quad (2.95)$$

En (2.95) se ha aproximado \vec{d}_k por \vec{U}_k , por lo antes explicado, además de usar la expresión para el tensor \mathbb{K} de (2.70); es importante recordar que \vec{R}_{ik} es el vector que apunta desde la partícula k hacia la partícula i . Si se descompone \vec{U}_k en sus componentes paralelas y perpendicular a \vec{R}_{ik} , *i.e.*,

$$\vec{U}_k = U_{k\parallel} \hat{R}_{ik} + U_{k\perp} \hat{R}_{ik\perp}$$

con \hat{R}_{ik} el vector unitario (*i.e.*, de módulo igual a uno) paralelo a \vec{R}_{ik} y $\hat{R}_{ik\perp}$ el vector unitario perpendicular a \vec{R}_{ik} ; con esto, la expresión en (2.95) puede escribirse como

$$\begin{aligned} \vec{F}_i^{\text{principal}} &\propto -L \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{a_k^2}{R_{ik}^2} \left(U_{k\parallel} \hat{R}_{ik} + U_{k\perp} \hat{R}_{ik\perp} - 2 \frac{(U_{k\parallel} \hat{R}_{ik} + U_{k\perp} \hat{R}_{ik\perp}) \cdot R_{ik} \hat{R}_{ik}}{R_{ik}^2} \vec{R}_{ik} \right) \\ &= L \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{a_k^2}{R_{ik}^2} (U_{k\parallel} \hat{R}_{ik} - U_{k\perp} \hat{R}_{ik\perp}) \end{aligned} \quad (2.96)$$

Del resultado obtenido en (2.96) se puede deducir que si la partícula k se mueve en la misma línea que separa a ambas partículas ($U_{k\perp} = 0$), la fuerza que ejerce sobre i apunta en el mismo sentido que la velocidad de la partícula k . En el caso de que k se mueva perpendicular a la línea que separa a ambas partículas ($U_{k\parallel} = 0$), entonces el signo menos indica que la fuerza apunta en el sentido *opuesto* al desplazamiento de la partícula, *i.e.*, hay un “anti-arrastre” efectuado por la partícula k . Esto no se observa en el caso de tres dimensiones, en dicho caso la fuerza no cambia de signo con respecto a la velocidad. Este interesante fenómeno que aparece en dos dimensiones es conocido con el nombre de *antidrag*.

Es muy interesante notar que ambas de estas características del sistema (el decaimiento y el *antidrag*) ya fueron observadas en experimentos [13] y predichas en la teoría de la Dra. Álvarez [1, 2].

Recordando la ecuación para el vector dipolar,

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbb{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \quad (2.97)$$

se puede simplificar la ecuación (2.94), pues

$$-(\pi a_i)^2 L \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N (\mathbb{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) = -(\pi a_i)^2 L \left[\vec{d}_i - \frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \right] \quad (2.98)$$

Se concluye que la fuerza sobre la partícula i de la suspensión es

$$\begin{aligned} \vec{F}_i &= -(\pi a_i)^2 L \left[\vec{d}_i - \frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \right] - (\pi a_i)^2 L \vec{d}_i \\ \vec{F}_i &= -(\pi a_i)^2 L \left[2\vec{d}_i - \frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \right] \end{aligned} \quad (2.99)$$

Al observar este resultado, resulta natural considerar una nueva definición para el vector dipolar. Si se redefine \vec{d} según

$$\vec{d} \equiv \frac{3\eta}{\pi H^2} \tilde{d} \rightarrow \frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{d}$$

Es decir, omitiendo la “tilde” para no hacer engorrosa la notación, se tiene que

$$\begin{aligned} \vec{F}_i &= -(\pi a_i)^2 L \left[2\frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{d}_i - \frac{3\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \right] \\ \vec{F}_i &= -(\rho \pi a_i^2 L) \left(\frac{3\eta}{\rho H^2} \right) [2\vec{d}_i - \vec{U}_i] \\ &\quad (\text{Es decir, se agregó un } \rho \text{ – densidad del fluido – en el numerador y denominador}) \end{aligned} \quad (2.100)$$

Convenientemente se han construido dos cantidades importantes: $(\rho \pi a_i^2 L)$ corresponde a la masa del fluido desplazado por la partícula i (que se denominará m_f), mientras que $(3\eta)/(\rho H^2)$ corresponde al tiempo de decaimiento típico del fluido, τ_f ; este tiempo corresponde al tiempo que le toma al fluido alcanzar el estado estacionario luego de una perturbación. Se puede observar que bajo esta nueva definición de \vec{d} , el vector dipolar tiene dimensiones de velocidad.

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} (2\vec{d}_i - \vec{U}_i) \quad (2.101)$$

2.3.2. Redefiniciones

Dado que se redefinió el vector dipolar, también hay que considerar a los demás tensores. Se redefine entonces

$$\mathbf{Q} \equiv 2\frac{3\eta}{\pi H^2} \tilde{\mathbf{Q}} = 2C\tilde{\mathbf{Q}} \quad (2.102)$$

Se ha definido $C \equiv (3\eta)/(\pi H^2)$ para simplificar la notación. Luego, falta ver cómo cambian las ecuaciones del modelo cuadrupolar.

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} \mathbb{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k + C\vec{U}_i \quad (2.103)$$

Dividiendo por C , y definiendo $\vec{d} = \vec{d}_i/C$, $\vec{Q} = \mathbf{Q}/2C$ y $\vec{L} \equiv 2\mathbf{L}$, se obtiene

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} \mathbf{K}_{ik} \vec{d}_k + \vec{L}_{ik} \vec{Q}_k + \vec{U}_i \quad (2.104)$$

Para el tensor cuadrupolar,

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{k \neq i} \mathbf{M}_{ik} \vec{d}_k + \mathbf{N}_{ik} \mathbf{Q}_k \quad (2.105)$$

Dividiendo por $2C$ y definiendo $\vec{M}_{ik} \equiv \frac{1}{2} \mathbf{M}_{ik}$, se obtiene

$$\vec{Q}_i = \sum_{k \neq i} \vec{M}_{ik} \vec{d}_k + \mathbf{N}_{ik} \vec{Q}_k \quad (2.106)$$

Con estas nuevas definiciones se ha obtenido un modelo cuya notación es más simple y del cual se puede tener un poco más de intuición, pues el vector dipolar ahora tiene unidades de velocidad. Finalmente, un resumen del modelo que se ha obtenido (omitiendo las tildes para simplificar la notación)

$$\begin{aligned} \omega_i(\vec{r}_i) &= \frac{3\eta}{\pi H^2} \{ \vec{d}_i \cdot \hat{n}_i + 2 \hat{n}_i \cdot \mathbf{Q}_i \cdot \hat{n}_i \} \quad (2.107) \\ \vec{d}_i &= \sum_{k \neq i} (\mathbf{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbf{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i \\ \mathbf{Q}_i &= \sum_{k \neq i} (\mathbf{M}_{ik} \vec{d}_k + \mathbf{N}_{ik} \mathbf{Q}_k) \\ (\mathbf{K}_{ik})_{np} &= \frac{a_k^2}{R_{ik}^2} \{ \delta_{np} - 2 \hat{R}_n \hat{R}_p \} \\ (\mathbf{L}_{ik})_{npq} &= \frac{a_k^3}{R_{ik}^3} \{ (\hat{R}_n \delta_{pq} + \hat{R}_p \delta_{qn} + \hat{R}_q \delta_{np}) - 4 \hat{R}_n \hat{R}_p \hat{R}_q \} \\ (\mathbf{M}_{ik})_{pql} &= \frac{a_i a_k^2}{R_{ik}^3} \{ 4 \hat{R}_p \hat{R}_q \hat{R}_l - (\delta_{pq} \hat{R}_l + \delta_{ql} \hat{R}_p + \delta_{pl} \hat{R}_q) \} \\ (\mathbf{N}_{ik})_{pqln} &= \frac{a_i a_k^3}{R_{ik}^4} \left\{ 12 \hat{R}_p \hat{R}_q \hat{R}_l \hat{R}_n - 3 \delta_{pq} \hat{R}_l \hat{R}_n - \frac{3}{2} [(\delta_{lp} \hat{R}_q + \delta_{ql} \hat{R}_p) \hat{R}_n + (\delta_{np} \hat{R}_q + \delta_{qn} \hat{R}_p) \hat{R}_l] \right\} \end{aligned}$$

Una interesante consecuencia de estas nuevas definiciones es que para una suspensión de partículas idénticas (todas con el mismo radio) se cumple que

$$\mathbf{M}_{ik} = -\mathbf{L}_{ik}$$

2.4. Aplicación del modelo

Haber obtenido finalmente el modelo cuadrupolar permitirá calcular cantidades importantes para una suspensión, *e.g.*, la velocidad terminal o su desviación estándar. Sin embargo, se observa que surge un obstáculo. Un sencillo ejemplo es más esclarecedor que cualquier explicación.

Se recuerda primero la expresión obtenida para la fuerza sobre la partícula i , a la cual se le añade el efecto de la gravedad.

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} [2\vec{d}_i - \vec{U}_i] + m\vec{g} \quad (2.108)$$

En este caso m corresponde a la masa *efectiva* de la partícula i , debido a que hay que tomar en cuenta el efecto de la fuerza de flotación. Cuando la partícula llega al estado estacionario, se tiene que $\vec{F}_i = 0$. Luego, despejando de la ecuación (2.108) se deduce que

$$\vec{U}_i = 2\vec{d}_i - \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} \quad (2.109)$$

La ecuación (2.109) corresponde, por lo tanto, a la velocidad terminal para la partícula i . Sin embargo, lo que realmente interesa es la velocidad terminal promedio para la suspensión, no para cada una de las N partículas (principalmente porque N puede ser un número **mu**y grande); luego, lo que corresponde hacer es calcular el *promedio* de la ecuación (2.109).

$$\langle \vec{U} \rangle = 2\langle \vec{d} \rangle - \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} \quad (2.110)$$

Luego, se tiene que es necesario calcular el promedio de \vec{d} . Para ello, se recuerda que

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbb{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i \quad (2.111)$$

Como se puede apreciar, dado que \mathbb{K} aparece en la ecuación para \vec{d} , resulta natural que, al momento de desear calcular promedios, aparezcan promedios de \mathbb{K} . Un promedio involucra integrales sobre todo el espacio, lo cual se traduce en integrales espaciales de este tensor, *i.e.*, es necesario calcular

$$\int \mathbb{K}(\vec{R}) d^2 R$$

He aquí el problema: el tensor \mathbb{K} decae como R^{-2} , por lo que no se puede calcular esta integral. Como el medio es infinito en el plano xy , esta integral se puede escribir en coordenadas cilíndricas como

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\infty \mathbb{K}(\vec{R}) R dR d\phi$$

Esta integral es bastante curiosa, dado que si uno integra en la variable R , se encuentra con una divergencia; sin embargo, si uno integra primero en la variable ϕ , el resultado es *cero*. Este tipo de integrales se conocen como *condicionalmente convergentes*.

Este problema de convergencia al calcular cantidades físicas importantes hace bastante tiempo que se conoce en tres dimensiones, *e.g.*, la divergencia en el cálculo de la velocidad terminal notada por primera vez por Smoluchowski [34], y resuelta por Batchelor [4] (en forma más rigurosa que otros intentos anteriores al utilizar cuidadosamente la mecánica estadística, por lo menos). El cálculo de las fluctuaciones de la velocidad terminal también a suscitado controversia, desde que Caffish y Luke dedujesen teóricamente que estas fluctuaciones son proporcionales al tamaño del sistema; por lo tanto, al tomar el límite de un sistema infinito, las fluctuaciones divergen [11].

Como conclusión, es necesario primero enfrentar este dilema si es que se desea aplicar el modelo cuadrupolar en forma correcta.

Capítulo 3

Imágenes

Resumen

Para desarrollar un modelo consistente que no presente problemas de convergencia al momento de calcular propiedades físicas de una suspensión, en este capítulo se incorpora la presencia de paredes en el sistema; más específicamente, se estudia el efecto que tiene una pared vertical y un fondo en la dirección de sedimentación. Mediante una extensión adecuada del clásico método de imágenes de electrostática, se aplican las condiciones de borde de no penetración en las paredes. Se recupera la misma forma funcional del modelo planteado en el capítulo anterior, gracias a una modificación en las expresiones para los tensores que permite incorporar el efecto de las nuevas condiciones de borde. Este nuevo modelo conduce a integrales que convergen a grandes distancias. Debido a una divergencia en el origen se presenta un método específico que permite calcularlas correctamente.

3.1. Método de Imágenes

Ciertos estudios en tres dimensiones (*e.g.*, análisis teórico de sedimentación en presencia de una pared en el fondo [8], o en un contenedor esférico [7], y también estudios numéricos [23, 28, 29]) indican que la existencia de paredes que contienen al fluido afecta la evolución del proceso de sedimentación. Físicamente, al sedimentar una partícula ésta provoca una perturbación en el fluido que, al considerar el caso ideal de un fluido totalmente incompresible, se transmite en forma instantánea a lo largo de todo el sistema; considerar un fondo en la dirección de sedimentación implica que debe haber una recirculación del fluido en respuesta a este flujo provocado por la partícula al sedimentar. Este contraflujo es el que afecta la dinámica de la suspensión.

Este efecto producido por las paredes del contenedor podría conducir a la convergencia de integrales pertinentes a importantes cantidades físicas medibles, como la velocidad terminal de las partículas y la desviación estándar de la velocidad. Por lo tanto, se desea incorporar el efecto de las condiciones de borde, *i.e.*, la existencia de paredes en el modelo estudiado, para lo cual se utilizará el *método de imágenes*.

Primero se recordará en qué consiste este método. En el caso de electromagnetismo, cuando se desea calcular el potencial debido a la presencia de una carga q a una distancia L de un plano conductor infinito, se resuelve el problema equivalente de calcular el potencial para el sistema de

una carga q y $-q$, separadas una distancia $2L$ una de otra (ver figura 3.1).

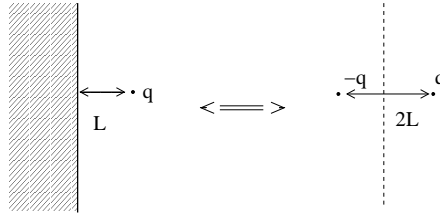


Figura 3.1: Una carga q cerca de un plano conductor (izquierda) y el problema equivalente de la misma carga q junto con su carga imagen $-q$ (derecha).

Se puede utilizar el método de imágenes en este problema de suspensiones debido a que el problema matemático que se busca resolver es la ecuación de Laplace para la presión con condiciones de borde de Newman. A continuación se muestra un paralelo entre electromagnetismo (columna de la izquierda) y el modelo de Hele-Saw (columna de la derecha).

$$\nabla^2 \phi = 0 \qquad \nabla_{\parallel}^2 p = 0 \qquad (3.1)$$

$$\vec{E} \cdot \hat{n} |_{\text{conductor}} = -\vec{\nabla} \phi \cdot \hat{n} = 0 \qquad \vec{v}_{\parallel} \cdot \hat{n} = -\frac{H^2}{2\eta} \vec{\nabla}_{\parallel} p \cdot \hat{n} = 0 \qquad (3.2)$$

Como se puede apreciar de la ecuación (3.1), en electromagnetismo se tiene la ecuación de Laplace para el potencial, mientras que en el modelo de Hele-Shaw es para la presión.

En la ecuación (3.2) aparecen las condiciones de borde a imponer en cada caso, en donde \hat{n} es el vector normal a la superficie. En electromagnetismo se impone que la componente normal del campo electromagnético \vec{E} es cero en el conductor; en el modelo de Hele-Shaw, esto es equivalente a imponer que la componente normal del campo de velocidad del fluido se anule en la pared. Gracias a esta equivalencia en los sistemas de ecuaciones a resolver en cada caso, se concluye que, dado que el método de imágenes funciona para electromagnetismo, también funcionará para el modelo de Hele-Shaw.

Habiendo argumentado porqué funciona el método de imágenes en este contexto, se procede a explicar el sistema que se analizará. Para el problema que se desea resolver en esta tesis, se considerará una partícula de prueba ubicada cerca de dos paredes del recipiente (una lateral y el fondo,

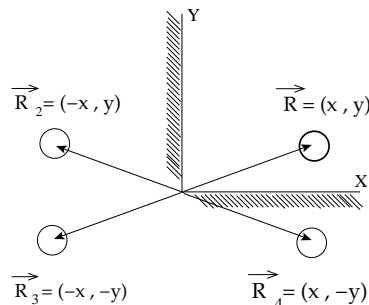


Figura 3.2: Una partícula cerca de dos paredes y las imágenes asociadas a ella. La partícula puede desplazarse en el plano XY .

como aparece en la figura 3.2). El método de imágenes utilizado en este contexto consiste en modelar la existencia de paredes mediante la presencia de 3 “partículas imágenes” como consecuencia de la existencia de la partícula de prueba.

Se definen: $\vec{R} = (x, y)$ para la posición de la partícula de prueba y $\vec{R}_2 = (-x, y)$, $\vec{R}_3 = (-x, -y)$, $\vec{R}_4 = (x, -y)$ para las posiciones de las imágenes (ver figura 3.2). Las paredes quedan representadas por $Y=0$ (fondo) y $X=0$ (pared lateral).

La expresión obtenida para el campo de velocidad del fluido en el plano XY en el capítulo 2 (utilizando las nuevas definiciones dadas en la sección (2.3.2)) corresponde a

$$\begin{aligned} \vec{v}_{\parallel}(\vec{r}) = & -G(z) \frac{3}{2\pi} \sum_{k=1}^N \pi a_k^2 \left\{ \frac{\vec{d}_k}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^2} - 2 \frac{\vec{d}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} (\vec{r} - \vec{R}_k) \right\} \\ & + \pi a_k^3 \left\{ 2 \frac{\mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} - 4 \frac{(\vec{r} - \vec{R}_k) \cdot \mathbf{Q}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^6} (\vec{r} - \vec{R}_k) \right\} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Sin embargo, dado que el tensor \mathbf{Q} decae lo suficientemente rápido, no es necesario incorporarlo en el análisis (no hay problemas de convergencia). Usando la notación: $\vec{d}_k = (\alpha^k, \beta^k)$ para la partícula de prueba y $\vec{d}_{k_\mu} = (\alpha^{k_\mu}, \beta^{k_\mu})$ (con $\mu \in \{2, 3, 4\}$) para los vectores dipolares asociados a las imágenes, además de los vectores posición antes expresados, se obtiene que el modelo a estudiar

$$\begin{aligned} \vec{v}_{\parallel}(\vec{r}) = & -G(z) \frac{3}{2\pi} \sum_{k=1}^N \pi a_k^2 \left\{ \frac{\vec{d}_k}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^2} - 2 \frac{\vec{d}_k \cdot (\vec{r} - \vec{R}_k)}{\|\vec{r} - \vec{R}_k\|^4} (\vec{r} - \vec{R}_k) \right\} \\ & + (\text{paredes}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

puede ser expresado de la siguiente manera gracias a la incorporación de las partículas imágenes.

$$\begin{aligned} \vec{v}_{\parallel}(\vec{r}) = & -G(z) \frac{3}{2\pi} \left\{ \sum_{k=1}^N \pi a_k^2 \left[\frac{\vec{d}_k}{(r_x - x)^2 + (r_y - y)^2} - 2 \frac{(\alpha^k(r_x - x) + \beta^k(r_y - y))}{((r_x - x)^2 + (r_y - y)^2)^2} (\vec{r} - \vec{R}_k) \right] \right. \\ & + \pi a_k^2 \left[\frac{\vec{d}_{k_2}}{(r_x + x)^2 + (r_y - y)^2} - 2 \frac{(\alpha^{k_2}(r_x + x) + \beta^{k_2}(r_y - y))}{((r_x + x)^2 + (r_y - y)^2)^2} (\vec{r} - \vec{R}_{k_2}) \right] \\ & + \pi a_k^2 \left[\frac{\vec{d}_{k_3}}{(r_x + x)^2 + (r_y + y)^2} - 2 \frac{(\alpha^{k_3}(r_x + x) + \beta^{k_3}(r_y + y))}{((r_x + x)^2 + (r_y + y)^2)^2} (\vec{r} - \vec{R}_{k_3}) \right] \\ & \left. + \pi a_k^2 \left[\frac{\vec{d}_{k_4}}{(r_x - x)^2 + (r_y + y)^2} - 2 \frac{(\alpha^{k_4}(r_x - x) + \beta^{k_4}(r_y + y))}{((r_x - x)^2 + (r_y + y)^2)^2} (\vec{r} - \vec{R}_{k_4}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde los tres últimos términos representan el cambio en el campo de velocidades del fluido debido a la presencia de estas imágenes; incorporar estos términos es equivalente a incorporar el efecto de las paredes si además se imponen las condiciones de *no penetración*: $\vec{v}_{\parallel}(\vec{r}) \cdot \hat{x}|_{x=0} = 0$, $\forall y > 0$ y $\vec{v}_{\parallel}(\vec{r}) \cdot \hat{y}|_{y=0} = 0$, $\forall x > 0$.

La primera condición se satisface si se cumplen las siguientes relaciones entre las componentes de los vectores dipolares

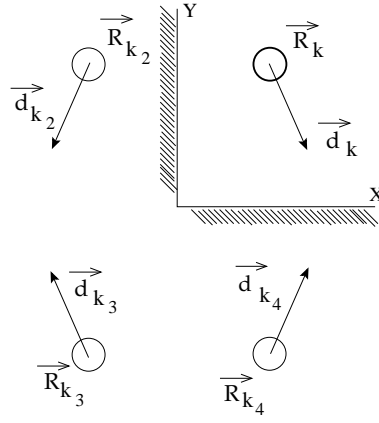


Figura 3.3: Los vectores dipolares para la partícula de prueba y sus imágenes. Notar que es similar a las reflexiones en un espejo.

$$\begin{aligned} \alpha^k &= -\alpha^{k_2} & ; & & \beta^{k_4} &= \beta^{k_2} \\ \alpha^{k_3} &= -\alpha^{k_4} & ; & & \beta^{k_3} &= \beta^{k_4} \end{aligned}$$

La segunda condición se satisface si

$$\begin{aligned} \alpha^k &= \alpha^{k_4} & ; & & \beta^k &= -\beta^{k_4} \\ \alpha^{k_2} &= -\alpha^{k_3} & ; & & \beta^{k_2} &= -\beta^{k_3} \end{aligned}$$

Con esto se concluye que se debe tener las siguientes relaciones

$$\vec{d}_k = \begin{pmatrix} \alpha^k \\ \beta^k \end{pmatrix} ; \quad \vec{d}_{k_2} = \begin{pmatrix} -\alpha^k \\ \beta^k \end{pmatrix} ; \quad \vec{d}_{k_3} = \begin{pmatrix} -\alpha^k \\ -\beta^k \end{pmatrix} ; \quad \vec{d}_{k_4} = \begin{pmatrix} \alpha^k \\ -\beta^k \end{pmatrix}$$

Estas expresiones para los vectores dipolares son reminiscentes a las reflexiones en un espejo (ver figura 3.3).

Dado que el efecto de la existencia de paredes se modeló mediante la incorporación de imágenes con sus propios vectores dipolares, se deduce que la ecuación para el vector dipolar más la condición de borde

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbb{K}(\vec{R}_{ik})\vec{d}_k + \mathbb{L}(\vec{R}_{ik})\mathbb{Q}_k) + \vec{U}_i + \text{(paredes)} \quad (3.6)$$

puede también modelarse mediante la incorporación de los vectores dipolares de las imágenes.

$$\begin{aligned} \vec{d}_i &= \sum_{k \neq i} \left\{ \mathbb{K}(\vec{R}_{ik})\vec{d}_k + \mathbb{K}(\vec{R}_{ik_2})\vec{d}_{k_2} + \mathbb{K}(\vec{R}_{ik_3})\vec{d}_{k_3} + \mathbb{K}(\vec{R}_{ik_4})\vec{d}_{k_4} \right. \\ &\quad \left. + \mathbb{L}(\vec{R}_{ik})\mathbb{Q}_k \right\} + \vec{U}_i + \text{(interacciones con las imágenes propias)} \end{aligned} \quad (3.7)$$

El tensor $\mathbb{K}(\vec{R}_{ik}) = \mathbb{K}_{ik}$ refleja la influencia de la partícula k sobre la partícula i y ya ha sido calculado. Falta calcular los tensores $\mathbb{K}(\vec{R}_{ik_\mu}) = \mathbb{K}_{ik_\mu}$ asociados a los aportes dados por las imágenes

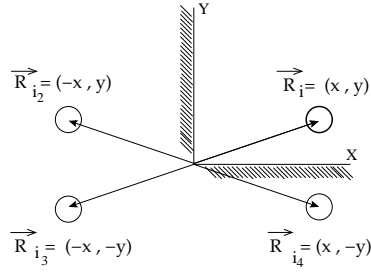


Figura 3.4: Configuración para el cálculo del aporte asociado a las imágenes propias.

de la partícula k sobre la partícula i ubicada en $\vec{R}_i = (x, y)$, incluyendo también las imágenes propias de la partícula i .

Primero se procederá al cálculo del aporte de las imágenes propias, es decir, a las imágenes existentes como consecuencia de la partícula misma estudiada (ver figura 3.4); se tiene que $\vec{R}_{ii_2} = \vec{R}_i - \vec{R}_{i_2} = (2x, 0)$, $\vec{R}_{ii_3} = (2x, 2y)$ y $\vec{R}_{ii_4} = (0, 2y)$. Recordando la expresión para el tensor \mathbb{K}

$$\mathbb{K}_{ik} = \frac{a_i^2}{R_{ik}^4} (\mathbb{I}R_{ik}^2 - 2\vec{R}_{ik}\vec{R}_{ik}) \quad (3.8)$$

se tiene que

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_{ii_2} &= \frac{a_i^2}{16x^4} \begin{bmatrix} -4x^2 & 0 \\ 0 & 4x^2 \end{bmatrix} \\ \mathbb{K}_{ii_3} &= \frac{a_i^2}{(4x^2 + 4y^2)^2} \begin{bmatrix} -4x^2 + 4y^2 & -8xy \\ -8xy & 4x^2 - 4y^2 \end{bmatrix} \\ \mathbb{K}_{ii_4} &= \frac{a_i^2}{16y^4} \begin{bmatrix} 4y^2 & 0 \\ 0 & -4y^2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.9)$$

De aquí que el aporte dado por las imágenes creadas por la propia partícula viene dado por

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_{ii_2}\vec{d}_{i_2} + \mathbb{K}_{ii_3}\vec{d}_{i_3} + \mathbb{K}_{ii_4}\vec{d}_{i_4} &= \mathbb{K}_{ii_2} \begin{pmatrix} -\alpha^i \\ \beta^i \end{pmatrix} + \mathbb{K}_{ii_3} \begin{pmatrix} -\alpha^i \\ -\beta^i \end{pmatrix} + \mathbb{K}_{ii_4} \begin{pmatrix} \alpha^i \\ -\beta^i \end{pmatrix} \\ &= \tilde{\mathbb{K}}_{ii_2} \begin{pmatrix} \alpha^i \\ \beta^i \end{pmatrix} + \tilde{\mathbb{K}}_{ii_3} \begin{pmatrix} \alpha^i \\ \beta^i \end{pmatrix} + \tilde{\mathbb{K}}_{ii_4} \begin{pmatrix} \alpha^i \\ \beta^i \end{pmatrix} \\ &\equiv \tilde{\mathbb{A}}_i \vec{d}_i \end{aligned} \quad (3.10)$$

Es decir, se pasaron los signos menos correspondientes desde los vectores dipolares hacia los tensores \mathbb{K} para poder factorizar los diversos tensores por el vector dipolar \vec{d}_i , y así formar un gran tensor modificado $\tilde{\mathbb{A}}_i$, cuya expresión es

$$\tilde{\mathbb{A}}_i = a_i^2 \left\{ \begin{bmatrix} \frac{1}{4x^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4x^2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{x^2 - y^2}{4(x^2 + y^2)^2} & \frac{xy}{2(x^2 + y^2)^2} \\ \frac{xy}{2(x^2 + y^2)^2} & \frac{-x^2 + y^2}{4(x^2 + y^2)^2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{4y^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4y^2} \end{bmatrix} \right\} \quad (3.11)$$

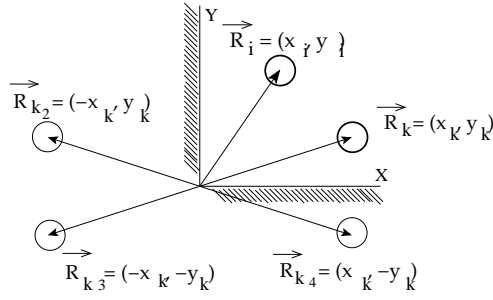


Figura 3.5: Configuración para el cálculo del aporte asociado al efecto de las imágenes asociadas a la partícula k sobre la partícula i .

Un cálculo similar se realiza para los demás aportes; se utilizará la notación $\vec{R}_i = (x_i, y_i)$, $\vec{R}_k = (x_k, y_k)$, $\vec{R}_{k_2} = (-x_k, y_k)$, $\vec{R}_{k_3} = (-x_k, -y_k)$, $\vec{R}_{k_4} = (x_k, -y_k)$, donde el subíndice que acompaña a k indica la imagen correspondiente (ver figura 3.5). De esta manera:

$$\vec{R}_{ik} = (x_i - x_k, y_i - y_k), \vec{R}_{ik_2} = (x_i + x_k, y_i - y_k), \vec{R}_{ik_3} = (x_i + x_k, y_i + y_k), \vec{R}_{ik_4} = (x_i - x_k, y_i + y_k)$$

Usando lo anterior para calcular, se obtiene:

$$\begin{aligned} & \mathbb{K}_{ik} \cdot \vec{d}_k + \mathbb{K}_{ik_2} \cdot \vec{d}_{k_2} + \mathbb{K}_{ik_3} \cdot \vec{d}_{k_3} + \mathbb{K}_{ik_4} \cdot \vec{d}_{k_4} \\ &= \mathbb{K}_{ik} \begin{pmatrix} \alpha^k \\ \beta^k \end{pmatrix} + \mathbb{K}_{ik_2} \begin{pmatrix} -\alpha^k \\ \beta^k \end{pmatrix} + \mathbb{K}_{ik_3} \begin{pmatrix} -\alpha^k \\ -\beta^k \end{pmatrix} + \mathbb{K}_{ik_4} \begin{pmatrix} \alpha^k \\ -\beta^k \end{pmatrix} \\ &= \mathbb{K}_{ik} \begin{pmatrix} \alpha^k \\ \beta^k \end{pmatrix} + \tilde{\mathbb{K}}_{ik_2} \begin{pmatrix} \alpha^k \\ \beta^k \end{pmatrix} + \tilde{\mathbb{K}}_{ik_3} \begin{pmatrix} \alpha^k \\ \beta^k \end{pmatrix} + \tilde{\mathbb{K}}_{ik_4} \begin{pmatrix} \alpha^k \\ \beta^k \end{pmatrix} \\ &\equiv \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \cdot \vec{d}_k \end{aligned} \tag{3.12}$$

En el último paso se pasaron los signos menos correspondientes desde los vectores dipolares hacia los tensores \mathbb{K} para así poder factorizar los diversos tensores por el vector dipolar \vec{d}_k , y así formar un gran tensor modificado $\tilde{\mathbb{K}}_{i;k}$. La expresión del tensor modificado es

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} = \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_i, \vec{R}_k) &= a_k^2 \left\{ \begin{array}{l} \left[\begin{array}{cc} \frac{-(x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2}{((x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2)^2} & \frac{-2(x_i - x_k)(y_i - y_k)}{((x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2)^2} \\ \frac{-2(x_i - x_k)(y_i - y_k)}{((x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2)^2} & \frac{(x_i - x_k)^2 - (y_i - y_k)^2}{((x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2)^2} \end{array} \right] \\ + \left[\begin{array}{cc} \frac{(x_i + x_k)^2 - (y_i - y_k)^2}{((x_i + x_k)^2 + (y_i - y_k)^2)^2} & \frac{-2(x_i + x_k)(y_i - y_k)}{((x_i + x_k)^2 + (y_i - y_k)^2)^2} \\ \frac{2(x_i + x_k)(y_i - y_k)}{((x_i + x_k)^2 + (y_i - y_k)^2)^2} & \frac{(x_i + x_k)^2 - (y_i - y_k)^2}{((x_i + x_k)^2 + (y_i - y_k)^2)^2} \end{array} \right] \\ + \left[\begin{array}{cc} \frac{(x_i + x_k)^2 - (y_i + y_k)^2}{((x_i + x_k)^2 + (y_i + y_k)^2)^2} & \frac{2(x_i + x_k)(y_i + y_k)}{((x_i + x_k)^2 + (y_i + y_k)^2)^2} \\ \frac{2(x_i + x_k)(y_i + y_k)}{((x_i + x_k)^2 + (y_i + y_k)^2)^2} & \frac{-(x_i + x_k)^2 + (y_i + y_k)^2}{((x_i + x_k)^2 + (y_i + y_k)^2)^2} \end{array} \right] \\ + \left[\begin{array}{cc} \frac{-(x_i - x_k)^2 + (y_i + y_k)^2}{((x_i - x_k)^2 + (y_i + y_k)^2)^2} & \frac{2(x_i - x_k)(y_i + y_k)}{((x_i - x_k)^2 + (y_i + y_k)^2)^2} \\ \frac{2(x_i - x_k)(y_i + y_k)}{((x_i - x_k)^2 + (y_i + y_k)^2)^2} & \frac{-(x_i - x_k)^2 + (y_i + y_k)^2}{((x_i - x_k)^2 + (y_i + y_k)^2)^2} \end{array} \right] \end{array} \right\} \quad (3.13)
\end{aligned}$$

A diferencia de \mathbb{K}_{ik} , $\tilde{\mathbb{K}}_{i;k}$ depende de las posiciones de ambas partículas i y k , no sólo de la posición relativa entre ellas.

De todo el análisis anterior se puede concluir que la ecuación que satisface el vector dipolar \vec{d} y que incorpora el efecto de las paredes es

$$\vec{d}_i = \sum_{\substack{k \neq i \\ k=1}}^N (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{d}_k + \mathbf{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i + \tilde{\mathbb{A}}_i \vec{d}_i \quad (3.14)$$

donde se ha escrito explícitamente que la suma en k involucra solamente las partículas reales del sistema, dado que el efecto de las imágenes (*i.e.* las paredes) ya se ha incorporado mediante los tensores $\tilde{\mathbb{K}}$ y $\tilde{\mathbb{A}}$. Si la partícula i se encuentra alejada de las paredes, el efecto de las imágenes sobre la partícula i es mucho menor en comparación con el efecto de las partículas reales. En este caso se tiene que $\tilde{\mathbb{A}} \approx 0$, con lo que se obtiene la ecuación

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{d}_k + \mathbf{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i \quad (3.15)$$

No se hizo también la aproximación $\tilde{\mathbb{K}} \approx \mathbb{K}$ porque, a pesar de ser cierto que la interacción entre la partícula i y una imagen de las otras partículas es muy débil en comparación con la interacción con las partículas reales, hay que tomar en cuenta que son muchas las imágenes en el sistema. Luego, al sumar estas muchas interacciones débiles se puede obtener un aporte significativo. Simplemente para explicar esto mejor, si todas las interacciones fuesen exactamente iguales entre sí, entonces no tiene importancia la suma en $k = 1 \dots N$, con $k \neq i$. Luego,

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i \quad (3.16)$$

$$= (N-1) \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{d}_k + (N-1) \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k + \vec{U}_i \quad (3.17)$$

para un cierto k ; luego, si informalmente se dice

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbb{K}} &= \mathbb{K}_{\text{interacciones por partículas reales}} + \mathbb{K}_{\text{interacciones por partículas imágenes}} \\ &= \mathbb{K} + \mathbb{K}_{\text{interacciones por partículas imágenes}} \end{aligned}$$

entonces, a pesar de que $\mathbb{K}_{\text{interacciones por partículas imágenes}}$ sea un término muy pequeño, el factor multiplicativo $N-1$ en general es *muy* grande para las suspensiones estudiadas, por lo que, *a priori*, no se pueden despreciar estas interacciones con las imágenes.

Aún así existen configuraciones donde la aproximación $\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} = \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_i, \vec{R}_k) \approx \mathbb{K}(\vec{R}_i - \vec{R}_k)$ es posible. Para las partículas que se encuentran alejadas de las paredes, los efectos de las imágenes sobre ellas son considerablemente débiles pues se ubican bastante lejos; por lo tanto, si se considera la interacción entre dos partículas reales lejanas a las paredes y que están cerca una de la otra (por ejemplo, las partículas i y k), esta interacción es mucho más importante que el efecto de las imágenes. Escrito de otra manera,

$$\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} = \underbrace{\mathbb{K}_{ik}}_{\text{Interacción entre partículas reales } i \text{ y } k} + \underbrace{\tilde{\mathbb{K}}_{ik_2} + \tilde{\mathbb{K}}_{ik_3} + \tilde{\mathbb{K}}_{ik_4}}_{\text{Interacciones con imágenes}} \simeq \mathbb{K}_{ik} \quad (3.18)$$

Ésta corresponde a la aproximación de $\tilde{\mathbb{K}}$ para partículas cercanas, la cual es muy importante para los cálculos que aparecen en los capítulos siguientes.

Los cálculos involucrados en tratar de obtener las cantidades físicas relevantes como la velocidad terminal, la varianza de la velocidad y otros promedios estadísticos involucran la siguiente integral

$$\int \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \quad (3.19)$$

El desarrollo anterior ha permitido clarificar que, debido al efecto de las condiciones de borde, en realidad el tensor que hay que utilizar es $\tilde{\mathbb{K}}$ y no \mathbb{K} , dado que es el primero el que incorpora el efecto de las paredes sobre la dinámica de la suspensión estudiada. Como se mostrará más adelante, el cálculo relevante es en realidad

$$\int_{\Omega} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 Y \quad (3.20)$$

donde Ω corresponde al dominio correspondiente al caso en particular que se estudia. Para el caso analizado anteriormente con dos paredes, una lateral (eje y) y otra siendo el fondo del recipiente (eje x), el tensor $\tilde{\mathbb{K}}$ está dado por la expresión (3.13). Un ejemplo sería calcular la integral de $\tilde{\mathbb{K}}$ en este espacio considerando el volumen excluido por las partículas. Es conveniente notar que las componentes del tensor $\tilde{\mathbb{K}}(x,y)$ decaen como Y^{-3} , a diferencia de $\mathbb{K}(\vec{R})$ que decae como R^{-2} , ya que esto permite una aproximación: el límite superior se puede extender a infinito sin mayor error; se tiene entonces

$$\int_{\Omega} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y = \int_{\|\vec{X}-\vec{Y}\| \geq 2a} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) Y dY d\phi \quad (3.21)$$

La integral en (3.21) se puede calcular sin importar si se integra primero en la variable ϕ ó Y , a diferencia del cálculo en (3.19), cuyo valor sí depende del orden de integración. El rápido decaimiento de $\widetilde{\mathbb{K}}$ hace que la integral sea incondicionalmente convergente.

Un problema surge cuando se desea calcular dicha integral en todo el espacio *incluyendo* el punto $\vec{Y} = \vec{X}$. A pesar de que $\widetilde{\mathbb{K}}$ decae suficientemente rápido como para que la integral converja en infinito, como se mencionó anteriormente, cuando las dos partículas están cerca una de otra se tiene que $\widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) \simeq \mathbb{K}(\vec{X} - \vec{Y}) = \mathbb{K}(\vec{R})$, y este tensor diverge como R^{-2} cuando $R \rightarrow 0$.

Es cierto que este cálculo no tiene mucho significado físico, pues considerar que $\|\vec{X} - \vec{Y}\| < 2a$ implica que las partículas se han traslapado. De todas maneras, la integral en todo el espacio se debe analizar pues, como se mostrará más adelante, aparece en los cálculos. Sin embargo, esta dificultad de la divergencia en $\vec{Y} = \vec{X}$ se puede evitar mediante un cálculo cuidadoso de la integral. Primero que nada, en vez de calcular

$$\int_{\Omega} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y$$

se calcula la integral equivalente

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{\Omega \\ \|\vec{X}-\vec{Y}\| \geq \epsilon}} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y \quad (3.22)$$

Esta integral está bien definida, es convergente y es físicamente razonable porque dos partículas no pueden estar en el mismo punto; se ha de mencionar que es importante realizar primero la integración y luego tomar el límite (estos cálculos no conmutan).

Mediante un cuidadoso manejo de la integral se puede verificar que es convergente. Dado que existen dos zonas identificadas como problemáticas, una es la convergencia en infinito y la otra es el origen, se procede a separar la integral por regiones: desde un radio $R = \|\vec{X} - \vec{Y}\| = \epsilon$ hasta cierto $R = \epsilon < \lambda \ll 1$, y desde $R = \lambda$ hasta infinito. Expresando los límites de integración en coordenadas polares, la integral en (3.22) queda

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{\Omega \\ R \geq \epsilon}} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\epsilon}^{\lambda} \int_0^{2\pi} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y + \int_{\lambda}^{\infty} \int_0^{2\pi} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y$$

Sin embargo, para la primera integral se puede utilizar la aproximación (3.18) pues en esta región se tiene que $R = \|\vec{X} - \vec{Y}\| \ll 1$, es decir, las partículas están cerca. Por lo tanto,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{\Omega \\ R \geq \epsilon}} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y \simeq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\epsilon}^{\lambda} \int_0^{2\pi} \mathbb{K}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y + \int_{\lambda}^{\infty} \int_0^{2\pi} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y \quad (3.23)$$

La segunda integral en (3.23) es convergente debido al rápido decaimiento de $\widetilde{\mathbb{K}}$. La primera integral se anula porque la integral angular de \mathbb{K} es cero. Notar que en este caso no importa si se integra primero en el radio o en el ángulo, pues la integral no considera el origen. Por lo tanto, se concluye que la integral en (3.22) es incondicionalmente convergente. Más aun, realizando este cálculo con el software “Mathematica” se obtiene que (3.22) es *cero*, *i.e.*,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{\Omega \\ \|\vec{X}-\vec{Y}\| \geq \epsilon}} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2Y = 0 \quad (3.24)$$

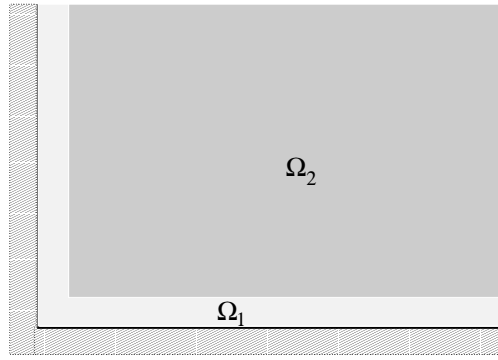


Figura 3.6: Sistema bidimensional con una pared lateral y un fondo. Se distingue la región cercana a las paredes Ω_1 (color claro) de aquella lejana a las paredes Ω_2 (color oscuro).

Hay un punto que es importante considerar al momento de realizar la aproximación en (3.23). Como se puede apreciar, la integración se realiza en todo el espacio y, por lo tanto, incluye la región cercana a la pared; sin embargo, la aproximación $\tilde{\mathbb{K}} \approx \mathbb{K}$ es válida sólo si las dos partículas, además de estar cerca, están lejos de las paredes. Bajo este argumento, se concluye que la aproximación en (3.23) no es válida.

Para remediar lo anterior, otra aproximación se realiza. Dado que el espacio de integración Ω es infinito ($\Omega = \{X > 0, Y > 0\}$ para el caso particular estudiado), se despreciará el aporte a la integral en (3.22) dado por la región cercana a la pared. Si se denota por Ω_1 a la región cercana a la pared y Ω_2 a la región complementaria, lo que se quiere expresar es

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{\Omega \\ R \geq \epsilon}} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 Y &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{\Omega_1 \\ R \geq \epsilon}} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 Y + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{\Omega_2 \\ R \geq \epsilon}} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 Y \\ &\simeq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\substack{\Omega_2 \\ R \geq \epsilon}} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 Y \end{aligned}$$

esto último porque $\Omega_1 \ll \Omega_2$ (ver figura 3.6). Finalmente, dado que en Ω_2 todas las partículas están lejos de la pared, la aproximación en (3.23) es válida.

Esta propiedad será de gran importancia en los siguientes capítulos, donde será importante tener cuidado con el desarrollo de manera de siempre considerar sólo integrales convergentes y poder así desarrollar una teoría consistente. Se menciona que el límite $\epsilon \rightarrow 0$ estará implícito en las integrales que tengan este problema (implícito para evitar hacer engorrosas las expresiones) y se escribirá explícitamente cuando sea necesario.

Capítulo 4

Velocidad terminal

Resumen

Dado que ya se posee un modelo adecuado para describir el sistema estudiado, se procede a calcular la velocidad promedio con que sedimentan las partículas de una suspensión bajo el efecto de la gravedad en el estado estacionario, i.e., *la velocidad terminal o de sedimentación*. Se deduce que para lograr este objetivo, es necesario calcular el vector dipolar promedio en el estado estacionario, para lo cual se utiliza el método de Born. Se inicia el desarrollo utilizando el modelo dipolar, pero debido a la complejidad de los cálculos, el estudio se limita a suspensiones diluidas, lo cual permite realizar aproximaciones y consecuentemente llegar a soluciones correctas a primer orden. Una vez obtenida la solución, se repite el cálculo utilizando el modelo cuadrupolar y se comparan los resultados obtenidos con ambos modelos y con el caso en tres dimensiones.

4.1. Ecuaciones de base

Al considerar una esfera sola en un fluido bajo el efecto de la gravedad, en el estado estacionario ésta alcanza cierta velocidad terminal debido a que la fuerza de gravedad se compensa con el roce viscoso del fluido. El resultado para una sola esfera fue mencionado en la introducción (página 4). Para una suspensión, dicho resultado se ve afectado por las interacciones hidrodinámicas entre las partículas, efecto que se intentará cuantificar en este capítulo.

Se procederá a calcular la velocidad de sedimentación para el caso de partículas idénticas, es decir, $a_i \equiv a, \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}$. Combinando el resultado obtenido anteriormente para la fuerza sobre la partícula i con el efecto de la gravedad se tiene que

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} [2\vec{d}_i - \vec{U}_i] + m\vec{g} \quad (4.1)$$

Cuando la partícula llega al estado estacionario, se tiene que $\vec{F}_i = 0$. Luego de imponer esta condición en la ecuación (4.1), se puede despejar la velocidad terminal de la partícula i .

$$\vec{U}_i = 2\vec{d}_i - \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} \quad (4.2)$$

Por lo tanto, si se logra determinar el vector dipolar \vec{d} se puede calcular la velocidad terminal \vec{U} .

Se tiene que

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i + \tilde{\mathbb{A}}_i \vec{d}_i \quad (4.3)$$

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbb{M}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{N}_{ik} \mathbf{Q}_k) \quad (4.4)$$

donde el efecto de las paredes del recipiente está incorporado en los tensores $\tilde{\mathbb{K}}_{i,k}$ y $\tilde{\mathbb{A}}_i$, deducido en el capítulo 3. Si ahora se procede a analizar un sistema en que la partícula i se encuentra alejada de las paredes, entonces las ecuaciones se simplifican ya que en este caso $\tilde{\mathbb{A}}_i \approx 0$. Si además en las ecuaciones anteriores (4.3) y (4.4) se reemplaza el valor obtenido para \vec{U}_i en (4.2), se obtiene el siguiente par de ecuaciones

$$\vec{d}_i = - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} \quad (4.5)$$

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbb{M}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{N}_{ik} \mathbf{Q}_k) \quad (4.6)$$

Notar el cambio de signo en (4.5) en comparación a (4.3). A primera vista la solución se obtiene simplemente despejando a partir del sistema de ecuaciones lineal anterior; sin embargo, este sistema consiste en $2N$ ecuaciones, por lo que despejar el vector dipolar \vec{d}_i implica invertir una matriz de $2N \times 2N$, lo cual es costoso computacionalmente para un gran número de partículas. Sin embargo, se puede obtener información a partir de un análisis analítico, para lo cual se empezará utilizando el *modelo dipolar* pues es más sencillo de analizar; este modelo es explicado a continuación.

4.1.1. Caso dipolar

El modelo dipolar consiste en considerar la ecuación (4.5) con $\mathbf{Q} = 0$, esto debido a que el término que contiene a este tensor en dicha ecuación decae más rápido con la distancia que el término con el tensor $\tilde{\mathbb{K}}$; la ecuación (4.6) no se toma en cuenta; es decir, este modelo utiliza sólo el principal aporte que permite distinguir al sistema del caso sin interacciones hidrodinámicas. Al usar estas aproximaciones se tiene

$$\vec{d}_i = \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{d}_k \quad (4.7)$$

Definiendo el vector $\vec{w} \equiv \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$ la ecuación anterior queda como

$$\vec{d}_i = \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{d}_k \quad (4.8)$$

Se procede a calcular el vector dipolar mediante aproximaciones sucesivas (conocido en algunas circunstancias bajo el nombre de “método de Born”).

O^0] (en la aproximación más baja, sin interacción entre partículas)

$$\vec{d}_i^{(0)} = \vec{w} \quad (4.9)$$

Este resultado indica que la aproximación de orden cero del vector dipolar corresponde a la velocidad de sedimentación \vec{w} de una sola partícula en un medio infinito.

O^1]

$$\begin{aligned} \vec{d}_i^{(1)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{d}_k^{(0)} \\ \vec{d}_i^{(1)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} \end{aligned} \quad (4.10)$$

O^2]

$$\begin{aligned} \vec{d}_i^{(2)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{d}_k^{(1)} \\ \vec{d}_i^{(2)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \left(\vec{w} - \sum_{l \neq k} \tilde{\mathbb{K}}_{k;l} \vec{w} \right) \\ \vec{d}_i^{(2)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq k} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \tilde{\mathbb{K}}_{k;l} \vec{w} \end{aligned} \quad (4.11)$$

En esta última ecuación el término con dos tensores $\tilde{\mathbb{K}}$ indica una multiplicación tensorial; escrito con índices y usando la convención de que índices repetidos se suman, se tiene que la componente p de la ecuación vectorial (4.11) es

$$(d_i^{(2)})_p = w_p - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{pq} w_q + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq k} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{pq} (\tilde{\mathbb{K}}_{k;l})_{qm} w_m \quad (4.12)$$

Para el desarrollo que sigue es importante separar la suma con $l = 1 \dots N$ en el término con $l = i$ de los demás con $l \neq i$. De esta manera la ecuación (4.11) queda

$$\vec{d}_i^{(2)} = \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \tilde{\mathbb{K}}_{k;i} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{\{l \neq i, l \neq k\}} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \tilde{\mathbb{K}}_{k;l} \vec{w} \quad (4.13)$$

El objetivo final consiste en calcular promedios estadísticos de los parámetros estudiados (en este caso, la velocidad de sedimentación). Debido a esto, antes de continuar con el método de Born es adecuado hacer un análisis de cómo se calculan estos promedios estadísticos, pues permitirá realizar aproximaciones que simplificarán el desarrollo.

Promedios estadísticos

El objetivo es poder calcular el promedio estadístico de las variables estudiadas, como por ejemplo $\langle \vec{d} \rangle$ (recordar el análisis de la sección 2.4). Para los efectos de este cálculo se supondrá que la expresión que se tiene hasta el momento (*i.e.*, segundo orden) para el vector dipolar corresponde al resultado exacto, es decir,

$$\vec{d}_i = \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \tilde{\mathbb{K}}_{k;i} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{\{l \neq i, k\}} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \tilde{\mathbb{K}}_{k;l} \vec{w} \quad (4.14)$$

Dado que se tiene un gran número de partículas en la suspensión ($N \gg 1$), no es muy útil este resultado para el vector dipolar de la i -ésima partícula, pues a pesar de que permite calcular la velocidad terminal para cada partícula de la suspensión, para ninguna aplicación práctica servirá tener N vectores velocidad terminal. Se procede entonces a calcular el vector dipolar *promedio* de esta configuración.

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{d}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\vec{w} - \dots) = \vec{w} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} + \dots \quad (4.15)$$

Sin embargo, también hay que considerar todas las diferentes configuraciones posibles, no solamente una configuración en particular. Esto se traduce en tomar un promedio estadístico utilizando la *función distribución configuracional de partículas* $\rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)$ [17], que cumple

$$\int \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) d^{2N}R = 1$$

Por lo tanto se procede a calcular

$$\int \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) (\text{ecuación (4.15)}) d^{2N}R$$

- El término del lado izquierdo de la ecuación (4.15) entrega el siguiente resultado

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \vec{d}_i d^2R_1 \dots d^2R_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \vec{d}_i \rangle \quad (4.16)$$

Es importante considerar la siguiente aproximación; es cierto que en general una suspensión de partículas no será homogénea, pero dado que se analiza la región en que todas las partículas están alejadas de las paredes, se considerará que en el estado estacionario esta región de la suspensión será homogénea. Por lo tanto, en promedio todas las partículas tienen un mismo $\langle \vec{d} \rangle$. Considerar una suspensión homogénea no es una mala suposición, pues en simulaciones numéricas en tres dimensiones [28, 29] se obtuvo un perfil uniforme para suspensiones monodispersas. En experimentos en tres dimensiones [14, 15, 25] se obtiene una suspensión visualmente uniforme mezclando la suspensión; se ha de mencionar, sin embargo, que el resultado del mezclar el sistema puede no corresponder a una suspensión con una distribución aleatoria uniforme (*i.e.*, igual probabilidad de ocupación para cada punto del espacio, considerando que las partículas no se pueden traslapar) [15].

Luego

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \vec{d}_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \vec{d} \rangle = \langle \vec{d} \rangle \quad (4.17)$$

- Dado que \vec{w} es un vector constante, el primer término al lado derecho de (4.15) queda igual.
- Se analizará ahora el segundo, tercer y cuarto término al lado derecho de (4.15).

$$\frac{1}{N} \int \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{k \neq i} -\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} + \sum_{i=1}^N \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \tilde{\mathbb{K}}_{k;i} + \sum_{i=1}^N \sum_{k \neq i} \sum_{\{l \neq i, k\}} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \tilde{\mathbb{K}}_{k;l} \right\} d^2 R_1 \dots d^2 R_N \vec{w} \quad (4.18)$$

Dado que la suspensión es homogénea, da lo mismo hablar de la partícula i -ésima, k -ésima, l -ésima o cualquier otra. De esta manera, se puede elegir $i = 1$, $k = 2$ y $l = 3$, con lo cual la expresión (4.18) es equivalente a

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \int \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \left\{ N(N-1)(-\tilde{\mathbb{K}}_{1;2}) + N(N-1)\tilde{\mathbb{K}}_{1;2}\tilde{\mathbb{K}}_{2;1} \right. \\ & \quad \left. + N(N-1)(N-2)\tilde{\mathbb{K}}_{1;2}\tilde{\mathbb{K}}_{2;3} \right\} d^2 R_1 \dots d^2 R_N \vec{w} \\ = & \frac{1}{N} \int \underbrace{\left(N(N-1) \int \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) d^2 R_3 \dots d^2 R_N \right)}_{\rho^{(2)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2)} \left\{ -\tilde{\mathbb{K}}_{1;2} + \tilde{\mathbb{K}}_{1;2}\tilde{\mathbb{K}}_{2;1} \right\} d^2 R_1 d^2 R_2 \vec{w} \\ & + \frac{1}{N} \int \underbrace{\left(N(N-1)(N-2) \int \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) d^2 R_4 \dots d^2 R_N \right)}_{\rho^{(3)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3)} \left\{ \tilde{\mathbb{K}}_{1;2}\tilde{\mathbb{K}}_{2;3} \right\} d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \vec{w} \end{aligned} \quad (4.19)$$

En la última expresión aparece la *función distribución configuracional reducida de n partículas* $\rho^{(n)}$ [17].

$$\rho^{(n)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \int \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) d^2 R_{n+1} d^2 R_{n+2} \dots d^2 R_N$$

Se usará la notación $\rho^{(2)}(1, 2) \equiv \rho^{(2)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2)$ y $\rho^{(3)}(1, 2, 3) \equiv \rho^{(3)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3)$, por lo que la expresión (4.19) queda

$$\frac{1}{N} \int \rho^{(2)}(1, 2) \left\{ \underbrace{-\tilde{\mathbb{K}}_{1;2}}_{(1)} + \underbrace{\tilde{\mathbb{K}}_{1;2}\tilde{\mathbb{K}}_{2;1}}_{(2)} \right\} d^2 R_1 d^2 R_2 \vec{w} + \frac{1}{N} \int \rho^{(3)}(1, 2, 3) \underbrace{\tilde{\mathbb{K}}_{1;2}\tilde{\mathbb{K}}_{2;3}}_{(3)} d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \vec{w} \quad (4.20)$$

Se procederá a analizar cada una de estas integrales por separado.

1.

$$\frac{-1}{N} \int \rho^{(2)}(1, 2) \tilde{\mathbb{K}}_{1;2} d^2 R_1 d^2 R_2 \quad (4.21)$$

Por definición se tiene que $\rho^{(2)}(1, 2) = \rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(2)g^{(2)}(1, 2)$ (escribiendo explícitamente la dependencia en los vectores, esto es $\rho^{(1)}(\vec{R}_1)\rho^{(1)}(\vec{R}_2)g^{(2)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2)$), con $g^{(n)}$ la *función distribución de n partículas*.

Se recuerda que se toman en cuenta solamente partículas lejos de las paredes y se supone que bajo esta condición la suspensión será homogénea; sin embargo, para medios homogéneos se cumple que $\rho^{(1)} = N/A = n$, con A el área total y n la densidad de partículas. Además $g^{(2)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)$, es decir, $g^{(2)}$ depende del vector separación entre partículas, no de la posición de cada una en particular. De esta manera se tiene que $\rho^{(2)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = n^2 g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)$.

Otro par de características de la distribución de pares $g^{(2)}$ es que a grandes distancias converge a uno, y se anula para una separación entre las partículas menor que un diámetro ($\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| < 2a$); esto refleja el hecho físico de que dos partículas no se pueden traslapar.

Por lo tanto, se obtiene entonces que la expresión en (4.21) es equivalente a

$$\frac{-n^2}{N} \int \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \quad (4.22)$$

La expresión en (4.22) está bien definida pues es incondicionalmente convergente. El rápido decaimiento de $\widetilde{\mathbb{K}}$ permite la rápida convergencia a grandes distancias de la integral. Notar que, como $g^{(2)}$ converge a uno a grandes distancias, si $\widetilde{\mathbb{K}}$ decayese como $\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\|^{-2}$, la integral no sería incondicionalmente convergente.

A pesar de que esta integral no posee problemas de convergencia, sí depende de la geometría y tamaño del sistema (recordar el análisis realizado en el capítulo 3; toda la información acerca de la geometría y tamaño del sistema está implícitamente incorporada en $\widetilde{\mathbb{K}}$). Esto es un inconveniente, pues significa que los cálculos realizados van a ser válidos sólo para la celda de Hele-Shaw particular que se consideró, y será necesario repetirlos para cada celda distinta que se desee utilizar.

A continuación se realizará un manejo algebraico de la expresión (4.22) para lograr superar este obstáculo. Dado que $\widetilde{\mathbb{K}}$ cumple $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{X} - \vec{Y}\| \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 Y = 0$ (recordar el análisis realizado en (3.24)), la expresión en (4.22) es equivalente a

$$\begin{aligned} & \frac{-n^2}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \\ & + \frac{n^2}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \\ & = \frac{-n^2}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) (g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) - 1) d^2 R_1 d^2 R_2 \\ & = \frac{-n^2}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) h^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \end{aligned} \quad (4.23)$$

donde se introdujo la *función correlación de pares* $h^{(2)}(\vec{X} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2)$. Esta función decae rápidamente con la distancia, siendo despreciable para cualquier valor de \vec{X} excepto para $\|\vec{X}\| = X \sim O(a)$, es decir, cuando el par de partículas está cerca. Por lo tanto, el integrando es despreciable excepto para configuraciones en que ambas partículas están cerca; sin embargo, en dicho caso se puede aproximar $\widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \approx \mathbb{K}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)$. Usando el cambio de variables $\vec{X} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$; $\vec{Y} = \vec{R}_2$,

$$\begin{aligned}
& \frac{-n^2}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) h^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \\
& \simeq \frac{-n^2}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{X}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \underbrace{\int d^2 Y}_{=A, \text{ el \u00e1rea total}} \\
& = -n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{X}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \tag{4.24}
\end{aligned}$$

En resumen, se ha deducido que

$$\frac{-n^2}{N} \int \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \simeq -n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{X}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \tag{4.25}$$

Lo importante a notar es que la integral del lado derecho de (4.25), al depender de \mathbb{K} en vez de $\widetilde{\mathbb{K}}$, *no depende del tama\u00f1o o geometr\u00eda del sistema*, y adem\u00e1s es incondicionalmente convergente.

Una consideraci\u00f3n importante es que, para que el an\u00e1lisis anterior sea v\u00e1lido, es necesario que el sistema sea suficientemente grande como para que las part\u00edculas estudiadas est\u00e9n suficientemente lejos de las paredes y as\u00ed poder realizar la aproximaci\u00f3n $\widetilde{\mathbb{K}} \approx \mathbb{K}$ (ver an\u00e1lisis que prosigue a la ecuaci\u00f3n (3.24)).

2.

$$\frac{n^2}{N} \int g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \widetilde{\mathbb{K}}_{2;1} d^2 R_1 d^2 R_2 \tag{4.26}$$

Se ha de notar que en la expresi\u00f3n (4.26) aparece la contracci\u00f3n entre dos tensores $\widetilde{\mathbb{K}}$. Recordando la expresi\u00f3n para este tensor, que aparece en la ecuaci\u00f3n (3.12), es del estilo *interacciones con part\u00edculas reales + interacciones con im\u00e1genes*. Se deduce entonces que la expresi\u00f3n en (4.26) se puede simplificar. En efecto, pues ya que la regi\u00f3n considerada consiste en part\u00edculas alejadas de las paredes, las interacciones con las im\u00e1genes son bastante d\u00e9biles en comparaci\u00f3n con las interacciones con las part\u00edculas reales. Por lo tanto, lo que se tiene es algo del estilo

$$\widetilde{\mathbb{K}} \widetilde{\mathbb{K}} \approx (\mathbb{K}_{\text{reales}} + \mathbb{K}_{\text{im\u00e1genes}}) (\mathbb{K}_{\text{reales}} + \mathbb{K}_{\text{im\u00e1genes}}) \approx \mathbb{K} \mathbb{K} + \text{t\u00e9rminos de mayor orden} \tag{4.27}$$

Continuando con el an\u00e1lisis, se concluye que en vez de (4.26) es suficiente analizar

$$\frac{n^2}{N} \int g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \mathbb{K}_{12} \mathbb{K}_{21} d^2 R_1 d^2 R_2 = \frac{n^2}{N} \int g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) (\mathbb{K}_{12})^2 d^2 R_1 d^2 R_2 \tag{4.28}$$

Se us\u00f3 la propiedad $\mathbb{K}_{ik} = \mathbb{K}_{ki}$. Usando el mismo cambio de variables usado para el t\u00e9rmino en (4.21),

$$\begin{aligned}
\frac{n^2}{N} \int g^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}^2(\vec{X}) d^2X d^2Y &= \frac{n^2}{N} \int g^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}^2(\vec{X}) d^2X \underbrace{\int d^2Y}_{=A} \\
&= n \int g^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}^2(\vec{X}) d^2X
\end{aligned} \tag{4.29}$$

3.

$$\frac{1}{N} \int \rho^{(3)}(1,2,3) \tilde{\mathbb{K}}_{1;2} \tilde{\mathbb{K}}_{2;3} d^2R_1 d^2R_2 d^2R_3 \tag{4.30}$$

Dada la uniformidad de la suspensión, $\rho^{(3)}(1,2,3) = n^3 g^{(3)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2, \vec{R}_2 - \vec{R}_3)$. Sin embargo, en vez de utilizar la función distribución de tríos¹, se usará la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
g^{(3)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2, \vec{R}_2 - \vec{R}_3) &= 1 + h^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) + h^{(2)}(\vec{R}_2 - \vec{R}_3) + h^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_3) \\
&\quad + h^{(3)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2, \vec{R}_2 - \vec{R}_3) \\
&= 1 + h^{(2)}(1,2) + h^{(2)}(2,3) + h^{(2)}(1,3) + h^{(3)}(1,2,3)
\end{aligned} \tag{4.31}$$

$h^{(3)}(1,2,3)$ es la *función correlación de tríos*. De esta manera se obtiene que (4.30) es igual a

$$\begin{aligned}
&\frac{n^3}{N} \left\{ \underbrace{\int \tilde{\mathbb{K}}_{1;2} \tilde{\mathbb{K}}_{2;3} d^2R_1 d^2R_2 d^2R_3}_{I_1} + \underbrace{\int \tilde{\mathbb{K}}_{1;2} \tilde{\mathbb{K}}_{2;3} h^{(2)}(1,2) d^2R_1 d^2R_2 d^2R_3}_{I_2} \right. \\
&+ \underbrace{\int \tilde{\mathbb{K}}_{1;2} \tilde{\mathbb{K}}_{2;3} h^{(2)}(2,3) d^2R_1 d^2R_2 d^2R_3}_{I_3} + \underbrace{\int \tilde{\mathbb{K}}_{1;2} \tilde{\mathbb{K}}_{2;3} h^{(2)}(1,3) d^2R_1 d^2R_2 d^2R_3}_{I_4} \\
&\left. + \underbrace{\int \tilde{\mathbb{K}}_{1;2} \tilde{\mathbb{K}}_{2;3} h^{(3)}(1,2,3) d^2R_1 d^2R_2 d^2R_3}_{I_5} \right\} \tag{4.32}
\end{aligned}$$

Se procede a analizar cada término por separado.

$I_1]$

$$\begin{aligned}
&\frac{n^3}{N} \int \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_2, \vec{R}_3) d^2R_1 d^2R_2 d^2R_3 \\
&= \frac{n^3}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \left\{ \int_{\|\vec{R}_2 - \vec{R}_3\| \geq \epsilon} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_2, \vec{R}_3) d^2R_3 \right\} d^2R_1 d^2R_2 \\
&= 0
\end{aligned} \tag{4.33}$$

¹Notar que $g^{(3)}$ depende de sólo dos vectores, pues el tercero queda inmediatamente determinado al dar los otros dos; por eso es redundante escribir $g^{(3)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2, \vec{R}_2 - \vec{R}_3, \vec{R}_1 - \vec{R}_3)$

La última igualdad gracias a la propiedad de $\widetilde{\mathbb{K}}$ explicada en (3.24) y usada en (4.23), en este caso usada para integrar en \vec{R}_3 .

$I_2]$

$$\begin{aligned} & \frac{n^3}{N} \int \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \widetilde{\mathbb{K}}_{2;3} h^{(2)}(1, 2) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \\ &= \frac{n^3}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) h^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \left\{ \int_{\|\vec{R}_2 - \vec{R}_3\| \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_2, \vec{R}_3) d^2 R_3 \right\} d^2 R_1 d^2 R_2 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.34)$$

$I_3]$ Un cálculo análogo al anterior entrega el mismo resultado.

$I_4]$

$$\frac{n^3}{N} \int \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \widetilde{\mathbb{K}}_{2;3} h^{(2)}(1, 3) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \quad (4.35)$$

Se cumple que $h^{(2)}(1, 3)$ es despreciable excepto cuando la partícula 1 está cercana a la partícula 3, i.e. $\|\vec{R}_1 - \vec{R}_3\| \sim O(a)$, por lo que hay que considerar este tipo de configuraciones para que el integrando no sea despreciable y contribuya a la integral. Si la partícula 2 estuviese muy lejos de 1 y 3, ambos $\widetilde{\mathbb{K}}_{1;2}$ y $\widetilde{\mathbb{K}}_{2;3}$ serían muy pequeños pues decaen rápidamente. Se concluye que el aporte del integrando es considerable sólo para configuraciones en que las tres partículas están cerca; se puede entonces aproximar $\widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \simeq \mathbb{K}_{12}$ y $\widetilde{\mathbb{K}}_{2;3} \simeq \mathbb{K}_{23}$

$$\begin{aligned} & \frac{n^3}{N} \int \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \widetilde{\mathbb{K}}_{2;3} h^{(2)}(1, 3) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \\ & \simeq \frac{n^3}{N} \int \mathbb{K}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \mathbb{K}(\vec{R}_2 - \vec{R}_3) h^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_3) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \end{aligned} \quad (4.36)$$

Escribiendo $\vec{R}_1 - \vec{R}_2 = \vec{R}_1 - \vec{R}_3 + \vec{R}_3 - \vec{R}_2$ y usando el cambio de variables $\vec{R}_1 - \vec{R}_3 = \vec{X}$; $\vec{R}_2 - \vec{R}_3 = \vec{Y}$, la expresión en (4.36) queda

$$\frac{n^3}{N} \int \mathbb{K}(\vec{X} - \vec{Y}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X d^2 Y \int d^2 R_3 = n^2 \int \mathbb{K}(\vec{X} - \vec{Y}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X d^2 Y \quad (4.37)$$

$I_5]$

$$\frac{n^3}{N} \int \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_2, \vec{R}_3) h^{(3)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2, \vec{R}_2 - \vec{R}_3) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \quad (4.38)$$

$h^{(3)}$ no es despreciable sólo en el caso en que las tres partículas están cerca. Luego, se puede hacer la misma aproximación usada en la integral anterior. Usando además el cambio de variables $\vec{R}_1 - \vec{R}_2 = \vec{X}$, $\vec{R}_2 - \vec{R}_3 = \vec{Y}$, la expresión (4.38) es aproximadamente equivalente a

$$\begin{aligned}
& \frac{n^3}{N} \int \mathbb{K}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \mathbb{K}(\vec{R}_2 - \vec{R}_3) h^{(3)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2, \vec{R}_2 - \vec{R}_3) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \\
&= \frac{n^3}{N} \int \mathbb{K}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(3)}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 X d^2 Y \int d^2 R_3 \\
&= n^2 \int \mathbb{K}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(3)}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 X d^2 Y
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Finalmente, se tiene que la integral en (4.30) es equivalente a

$$n^2 \left\{ \int \mathbb{K}(\vec{X} - \vec{Y}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X d^2 Y + \int \mathbb{K}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(3)}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 X d^2 Y \right\} \tag{4.40}$$

Recopilando todos los resultados de (4.15), (4.17) y (4.20) se obtiene la siguiente expresión para el vector dipolar promedio

$$\begin{aligned}
\langle \vec{d} \rangle &\simeq \vec{w} - n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} h^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + n \int g^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}^2(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\
&+ n^2 \left\{ \int \mathbb{K}(\vec{X} - \vec{Y}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X d^2 Y + \int \mathbb{K}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(3)}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 X d^2 Y \right\} \vec{w}
\end{aligned} \tag{4.41}$$

Es prudente realizar un análisis de los ordenes de magnitud de los términos que aparecen en esta expresión, dado que no todos aportan de igual forma al promedio de \vec{d} . Esto se hace mediante una *adimensionalización* de cada uno de ellos.

Primero,

$$n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} h^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \tag{4.42}$$

Dado que $h^{(2)}$ decae rápidamente a cero con la distancia y es de orden uno para separaciones del orden de diámetros de partículas (*i.e.*, $X \sim O(a)$), sólo las interacciones con partículas cercanas son las relevantes.

Este análisis, junto con la consideración de que $\mathbb{K} \sim O(1)$ para $X \sim O(a)$ indica que la longitud relevante es a , por lo que se procede a realizar el siguiente escalamiento

$$\vec{X} = a\vec{\mu}; \quad d^2 X = a^2 d^2 \mu$$

Se definirá $\widehat{\mathbb{K}}(\vec{\mu}) \equiv \mathbb{K}(a\vec{\mu}) = \mathbb{K}(\vec{X})$, y $\hat{h}^{(2)}(\vec{\mu}) \equiv h^{(2)}(\vec{X})$. Con esto la expresión (4.42) queda

$$na^2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mu \geq \epsilon/a} \hat{h}^{(2)}(\vec{\mu}) \widehat{\mathbb{K}}(\vec{\mu}) d^2 \mu$$

Como el integrando es $O(1)$ para $\mu \sim O(1)$ y decae a cero con μ rápidamente, la integral es una constante finita de $O(1)$ que se denotará por C_1 . Se concluye que

$$n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} h^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \equiv na^2 C_1 \quad (4.43)$$

Segundo,

$$n \int g^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}^2(\vec{X}) d^2 X \quad (4.44)$$

A pesar de que $g^{(2)}$ no decae rápidamente como lo hace $h^{(2)}$, \mathbb{K}^2 sí lo hace; por lo tanto, también se tiene que el aporte principal está dado para $X \sim O(a)$. Usando el mismo escalamiento y definiendo $\hat{g}^{(2)}(\vec{\mu}) \equiv g^{(2)}(\vec{X})$, se tiene

$$na^2 \int \hat{g}^{(2)}(\vec{\mu}) \widehat{\mathbb{K}}^2(\vec{\mu}) d^2 \mu$$

Por las mismas razones explicadas para la primera integral, la integral que aparece en esta expresión también es una constante C_2 de $O(1)$. Por lo tanto,

$$n \int g^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}^2(\vec{X}) d^2 X \equiv na^2 C_2 \quad (4.45)$$

Para la tercera integral,

$$n^2 \int \mathbb{K}(\vec{X} - \vec{Y}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X d^2 Y \quad (4.46)$$

Como nuevamente aparece la función correlación de pares $h^{(2)}$ se tiene que el integrando es despreciable excepto para $X \sim O(a)$; luego se podría decir (informalmente) que $\vec{X} - \vec{Y} \sim O(a) - \vec{Y}$. Se ha de notar entonces que si $Y \gg a$, $\mathbb{K}(\vec{X} - \vec{Y}) \mathbb{K}(\vec{Y}) \approx \mathbb{K}(-\vec{Y}) \mathbb{K}(\vec{Y}) \sim (\mathbb{K}(\vec{Y}))^2$; sin embargo, este tensor decae rápidamente con la distancia, por lo que se concluye que el integrando es despreciable si $Y \gg a$, a pesar de que $X \sim O(a)$.

De aquí que se deba considerar $X \sim O(a)$ e $Y \sim O(a)$, lo cual sugiere el escalamiento siguiente

$$\vec{X} = a\vec{\mu}; \quad \vec{Y} = a\vec{\nu}$$

con lo cual la integral en (4.46) queda

$$n^2 a^4 \int \mathbb{K}(\vec{\mu} - \vec{\nu}) \mathbb{K}(\vec{\nu}) \hat{h}^{(2)}(\vec{\mu}) d^2 \mu d^2 \nu \equiv n^2 a^4 C_3 \quad (4.47)$$

con C_3 una constante de orden uno pues el integrando también es de orden uno.

Finalmente, para la cuarta integral,

$$n^2 \int \mathbb{K}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{Y}) h^{(3)}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 X d^2 Y \quad (4.48)$$

La función correlación de tríos $h^{(3)}$ es $O(1)$ para el caso en que las tres partículas están próximas unas de otras (*i.e.*, $X \sim O(a)$, $Y \sim O(a)$, ya que \vec{X} e \vec{Y} son los vectores posición de

una partícula relativa a la otra). Además, $h^{(3)}$ es despreciable para el caso en que alguna de las 3 partículas esté alejada de las demás (*i.e.*, $X \gg a$ ó $Y \gg a$).

Este análisis indica que a sigue siendo la escala relevante, por lo que se realiza el mismo escalamiento usado para la tercera integral. Con esto la expresión (4.48) queda

$$n^2 a^4 \int \mathbb{K}(\vec{\mu}) \mathbb{K}(\vec{\nu}) h^{(3)}(\vec{\mu}, \vec{\nu}) d^2 \mu d^2 \nu \equiv n^2 a^4 C_4 \quad (4.49)$$

y C_4 es $O(1)$ pues para $\mu, \nu \sim O(1)$ se tiene que $\mathbb{K}(\vec{\mu})$ y $\mathbb{K}(\vec{\nu})$ son $O(1)$.

Ahora que ya se han analizado cada una de las integrales conviene introducir un nuevo parámetro en el modelo: $\Phi \equiv n\pi a^2$, la *fracción del área ocupada por las partículas*². Φ es una medida de qué tan concentrada es la suspensión. En los casos extremos, si Φ es cercana a 1 entonces la suspensión es muy concentrada, las partículas están próximas unas a otras y las interacciones hidrodinámicas ejercen una importante influencia sobre la dinámica del sistema; por el otro lado, si $\Phi \ll 1$ entonces la suspensión es muy diluida, las partículas están más alejadas unas de otras y las interacciones hidrodinámicas son más débiles; sin embargo, dado que son de largo alcance, no se pueden despreciar.

En resumen, se ha obtenido que

$$\begin{aligned} \langle \vec{d} \rangle &= \vec{w} - na^2 C_1 \vec{w} + na^2 C_2 \vec{w} + n^2 a^4 [C_3 + C_4] \vec{w} \\ &\sim \vec{w} + O(\Phi) \vec{w} + O(\Phi) \vec{w} + O(\Phi^2) \vec{w} \end{aligned} \quad (4.50)$$

Se ha de recordar que los términos de orden Φ^2 provinieron de las sumas dobles en el método iterativo de Born, mientras que los de orden Φ vinieron de las sumas simples. Si se consideran solamente suspensiones muy diluidas (*i.e.*, $\Phi \ll 1$) los términos de $O(\Phi^2)$ serán despreciables frente a los de $O(\Phi)$; por lo tanto, se puede concluir de todo este análisis que los términos con sumas dobles son despreciables frente a los de sumas simples pues aportarán muy poco en el cálculo final de $\langle \vec{d} \rangle$.

Se ha de mencionar que esta aproximación en que se desprecian las sumas dobles, como son aquellas en que se suma en los índices $k \neq i$ y $l \neq k, i$ frente a las sumas simples (suma en $k \neq i$ solamente) es equivalente a despreciar las interacciones de tríos de partículas (interacción entre las partículas i, k y l) frente a las interacciones de pares (interacción entre i y k). Se argumentó esta aproximación para suspensiones diluidas y además es corroborada por el estudio en [13].

Luego de este análisis relacionado a los promedios estadísticos y de entender cuáles son los términos más relevantes, se puede proseguir con el cálculo del vector dipolar que se detuvo en (4.13), considerando desde ahora solamente suspensiones muy diluidas. De esta manera se facilita el cálculo mediante la aproximación mencionada anteriormente.

$O^2]$

$$\begin{aligned} \vec{d}_i^{(2)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{ik} \tilde{\mathbb{K}}_{ki} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{\{l \neq i, l \neq k\}} \tilde{\mathbb{K}}_{ik} \tilde{\mathbb{K}}_{kl} \vec{w} \\ &\approx \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{ik} \tilde{\mathbb{K}}_{ki} \vec{w} \end{aligned} \quad (4.51)$$

²Particle Area Fraction

En la última expresión se despreció el término con doble suma gracias a la aproximación de suspensiones diluidas.

$O^3]$

$$\begin{aligned}\vec{d}_i^{(3)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{d}_k^{(2)} \\ \vec{d}_i^{(3)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \widetilde{\mathbb{K}}_{ki} \vec{w} - \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \widetilde{\mathbb{K}}_{ki} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{w} + O(\Phi^2)\end{aligned}\quad (4.52)$$

$O^4]$

$$\begin{aligned}\vec{d}_i^{(4)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{d}_k^{(3)} \\ \vec{d}_i^{(4)} &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \widetilde{\mathbb{K}}_{ki} \vec{w} - \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \widetilde{\mathbb{K}}_{ki} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \widetilde{\mathbb{K}}_{ki} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \widetilde{\mathbb{K}}_{ki} \vec{w} + O(\Phi^2)\end{aligned}\quad (4.53)$$

Ya se puede deducir la recurrencia; con cada nueva iteración, simplemente se añade un tensor $\widetilde{\mathbb{K}}$ con signo cambiado a la expresión para \vec{d}_i y los índices se van alternando. Sin embargo, esta expresión se puede simplificar aún más considerando que se analiza una suspensión diluida. Como se mencionó anteriormente ³, dado que el efecto de las imágenes es débil, las contracciones entre dos o más tensores $\widetilde{\mathbb{K}}$ puede reemplazarse por contracciones entre tensores \mathbb{K} , *i.e.*, $\widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \widetilde{\mathbb{K}}_{ki} \approx \mathbb{K}_{ik} \mathbb{K}_{ki} = (\mathbb{K}_{ik})^2$ (recordando que $\mathbb{K}_{ik} = \mathbb{K}_{ki}$). Por lo tanto, la expresión en (4.53) se puede aproximar por

$$\vec{d}_i^{(4)} = \vec{w} - \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{w} + \sum_{k \neq i} (\mathbb{K}_{ik})^2 \vec{w} - \sum_{k \neq i} (\mathbb{K}_{ik})^3 \vec{w} + \sum_{k \neq i} (\mathbb{K}_{ik})^4 \vec{w} + (\text{términos de mayor orden})\quad (4.54)$$

Como cada nueva iteración simplemente añade un tensor con el signo cambiado, se deduce que

$$\vec{d}_i^{(\infty)} = \vec{w} - \sum_{k \neq i} \widetilde{\mathbb{K}}_{ik} \vec{w} + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w}\quad (4.55)$$

Aplicando lo aprendido acerca del cálculo de promedios estadísticos (ver página 50) se deduce que

$$\langle \vec{d} \rangle = \vec{w} - n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} h^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + n \int g^{(2)}(\vec{X}) \left\{ \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}(\vec{X}))^q \right\} d^2 X \vec{w} + O(\Phi^2)\quad (4.56)$$

Esta expresión se simplifica al utilizar la relación (A.1) del apéndice que indica que $(\mathbb{K}_{ik})^2 = \left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^4 \mathbb{I}$, donde \mathbb{I} es el tensor identidad. Luego,

$$(\mathbb{K}_{ik})^{2q} = \left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^{4q} \mathbb{I} \quad ; \quad (\mathbb{K}_{ik})^{2q+1} = \left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^{4q} \mathbb{K}_{ik}$$

³Se analizó con mayor detalle en la expresión (4.27), página 54

Separando los términos pares de los impares de la suma en (4.56) se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle \vec{d} \rangle &= \vec{w} - n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} h^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + n \sum_{q=1}^{\infty} \int g^{(2)}(\vec{X}) (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2q} d^2 X \vec{w} \\
&\quad - n \sum_{q=1}^{\infty} \int g^{(2)}(\vec{X}) (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2q+1} d^2 X \vec{w} \\
&= \vec{w} - n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} h^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + n \sum_{q=1}^{\infty} \int g^{(2)}(\vec{X}) \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} d^2 X \vec{w} \\
&\quad - n \sum_{q=1}^{\infty} \int g^{(2)}(\vec{X}) \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \tag{4.57}
\end{aligned}$$

Se ha de recordar que el cálculo se inició utilizando el tensor $\widetilde{\mathbb{K}}$ que decae lo suficientemente rápido como para que su integral converja, sin importar el orden de integración. Luego del desarrollo se ha llegado a una expresión para $\langle \vec{d} \rangle$ que involucra integrales de \mathbb{K} , lo cual a primera vista podría ser un poco inquietante pues ya se sabe que la integral de \mathbb{K} es condicionalmente convergente; sin embargo, como se puede apreciar, todas las integrales involucradas son convergentes pues los integrandos decaen suficientemente rápido.

Para calcular estas integrales se necesita conocer las funciones $g^{(2)}$ y $h^{(2)}$. La dificultad es que no se conocen expresiones analíticas adecuadas de estas funciones para este tipo de sistemas. Una posibilidad es utilizar la aproximación a orden cero de $g^{(2)}$ y $h^{(2)}$, es decir,

$$g^{(2)}(\vec{X}) = \begin{cases} 0 & X < 2a \\ 1 & X \geq 2a \end{cases} \quad ; \quad h^{(2)}(\vec{X}) = g^{(2)}(\vec{X}) - 1 = \begin{cases} -1 & X < 2a \\ 0 & X \geq 2a \end{cases} \tag{4.58}$$

Como se puede apreciar, la única consideración que se toma en cuenta es la del espacio excluido por las partículas. Por lo tanto, se desprecian las interacciones hidrodinámicas entre ellas; dichas interacciones se restringen a ser netamente por contacto, como en el caso de esferas duras. Sin embargo, dado que en el capítulo 6 se buscará una mejor expresión para la función distribución de pares, se utilizará esta simple forma para $g^{(2)}$ y evitar así hacer más complejo el análisis. Mediante este accionar se busca recuperar el aporte principal a la dinámica del sistema.

La ecuación (4.57) queda

$$\begin{aligned}
\langle \vec{d} \rangle &= \vec{w} - n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{2\pi} \int_{\epsilon}^{2a} (-1) \mathbb{K}(\vec{X}) X dX d\phi \vec{w} \\
&\quad + n \sum_{q=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} X dX d\phi \vec{w} - n \sum_{q=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} \mathbb{K}(\vec{X}) X dX d\phi \vec{w} \tag{4.59}
\end{aligned}$$

En esta expresión, en vez de integrar hasta las paredes del recipiente se ha extendido el límite de integración hasta el infinito, pues dado que el integrando decae rápidamente la diferencia entre ambas expresiones es despreciable, considerando el orden de precisión con que se realiza este cálculo. Se tiene que la segunda y última integrales son cero gracias a la propiedad de \mathbb{K}

$$\int_0^{2\pi} \mathbb{K} d\phi = 0$$

Además, definiendo⁴ $\kappa \equiv \left(\frac{a}{X}\right)^4$

$$\sum_{q=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} = \sum_{q=1}^{\infty} \kappa^q = \frac{\kappa}{1-\kappa} = \frac{\left(\frac{a}{X}\right)^4}{1-\left(\frac{a}{X}\right)^4} = \frac{1}{\left(\frac{X}{a}\right)^4 - 1} \quad (4.60)$$

Con estos resultados, se tiene que (4.59) es igual a

$$\begin{aligned} \langle \vec{d} \rangle &= \vec{w} + n2\pi \int_{2a}^{\infty} \frac{X}{\left(\frac{X}{a}\right)^4 - 1} dX \vec{w} \\ &= \vec{w} + n2\pi \frac{a^2}{4} \ln(5/3) \vec{w} \\ &= \vec{w} + \underbrace{n\pi a^2}_{\Phi} \frac{1}{2} \ln(5/3) \vec{w} \\ &= \left(1 + \frac{1}{2} \ln(5/3) \Phi\right) \vec{w} \end{aligned} \quad (4.61)$$

y dado que $\vec{U}_i = 2\vec{d}_i - \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} = 2\vec{d}_i - \vec{w}$ (ecuación (4.2)), entonces $\langle \vec{U} \rangle = 2\langle \vec{d} \rangle - \vec{w}$. Por lo tanto, el resultado para la velocidad terminal es

$$\langle \vec{U} \rangle = 2\left(1 + \frac{1}{2} \ln(5/3) \Phi\right) \vec{w} - \vec{w} = \vec{w} \left(1 + \ln(5/3) \Phi\right) \quad (4.62)$$

4.1.2. Caso cuadrupolar

Se procederá a realizar nuevamente el cálculo para el vector dipolar, esta vez considerando el tensor cuadrupolar \mathbf{Q} . Las ecuaciones con las que se ha de trabajar son

$$\vec{d}_i = \vec{w} + \sum_{k \neq i} -\tilde{\mathbf{K}}_{i;k} \vec{d}_k + \sum_{k \neq i} -\mathbf{L}_{ik} \mathbf{Q}_k \quad (4.63)$$

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{k \neq i} -\mathbf{L}_{ik} \vec{d}_k + \sum_{k \neq i} \mathbf{N}_{ik} \mathbf{Q}_k \quad (4.64)$$

En la ecuación (4.64) se ha usado que para una suspensión de partículas idénticas (todas del mismo radio) se tiene que $\mathbf{M} = -\mathbf{L}$. Este mismo par de ecuaciones, mostrando explícitamente los índices que están contraídos (en que la convención de que índices repetidos se suman es utilizada), queda de la siguiente forma

$$(d_i)_p = w_p + \sum_{k \neq i} -(\tilde{\mathbf{K}}_{i;k})_{pm} (d_k)_m + \sum_{k \neq i} -(\mathbf{L}_{ik})_{pnl} (\mathbf{Q}_k)_{nl} \quad (4.65)$$

$$(\mathbf{Q}_i)_{pq} = \sum_{k \neq i} -(\mathbf{L}_{ik})_{pql} (d_k)_l + \sum_{k \neq i} (\mathbf{N}_{ik})_{pqln} (\mathbf{Q}_k)_{ln} \quad (4.66)$$

⁴Notar que $\kappa < 1$, pues $X \geq 2a$

Se recuerda que los índices i y k enumeran a las partículas ($i, k \in \{1, \dots, N\}$), mientras que los demás índices indican la componente del tensor.

Nuevamente se procede a calcular mediante el proceso iterativo descrito anteriormente⁵.
 $O^0]$

$$(d_i^{(0)})_p = w_p \quad (4.67)$$

$$(\mathbf{Q}_i^{(0)})_{pq} = 0 \quad (4.68)$$

$O^1]$

$$(d_i^{(1)})_p = w_p + \sum_{k \neq i} -(\tilde{\mathbf{K}}_{i;k})_{pm} (d_k^{(0)})_m + \sum_{k \neq i} -(\mathbf{L}_{ik})_{pnl} (\mathbf{Q}_k^{(0)})_{nl}$$

$$(d_i^{(1)})_p = w_p + \sum_{k \neq i} -(\tilde{\mathbf{K}}_{i;k})_{pm} w_m + 0 \quad (4.69)$$

$$(\mathbf{Q}_i^{(1)})_{pq} = \sum_{k \neq i} -(\mathbf{L}_{ik})_{pql} (d_k^{(0)})_l + \sum_{k \neq i} (\mathbf{N}_{ik})_{pqln} (\mathbf{Q}_k^{(0)})_{ln}$$

$$(\mathbf{Q}_i^{(1)})_{pq} = \sum_{k \neq i} -(\mathbf{L}_{ik})_{pql} w_l + 0 \quad (4.70)$$

$O^2]$

$$(d_i^{(2)})_p = w_p + \sum_{k \neq i} -(\tilde{\mathbf{K}}_{i;k})_{pm} \left[w_m + \sum_{\mu \neq k} -(\tilde{\mathbf{K}}_{k;\mu})_{ml} w_l \right] + \sum_{k \neq i} -(\mathbf{L}_{ik})_{pnl} \left[\sum_{\mu \neq k} -(\mathbf{L}_{k\mu})_{nl\lambda} w_\lambda \right] \quad (4.71)$$

Nuevamente se considerará suspensiones diluidas ($\Phi \ll 1$), lo cual permite simplificar las ecuaciones al considerar solamente los términos con $\mu = i$ en las sumas con $\mu \neq k$. Con esto en mente la ecuación (4.71) queda

$$(d_i^{(2)})_p \simeq w_p - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbf{K}}_{i;k})_{pm} w_m + \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbf{K}}_{i;k})_{pm} (\tilde{\mathbf{K}}_{k;i})_{ml} w_l + \sum_{k \neq i} (\mathbf{L}_{ik})_{pnl} (\mathbf{L}_{ki})_{nl\lambda} w_\lambda \quad (4.72)$$

Se puede utilizar una de las aproximaciones usadas en el cálculo con el modelo dipolar⁶, la cual consiste en considerar $\tilde{\mathbf{K}}_{i;k} \tilde{\mathbf{K}}_{k;i} \approx \mathbf{K}_{ik} \mathbf{K}_{ki}$.

Esta aproximación también se puede utilizar en otros casos, pues como en el modelo cuadrupolar se usan los tensores \mathbf{L} y \mathbf{N} entonces aparecerán términos del estilo $\mathbf{L}\tilde{\mathbf{K}}$ o $\mathbf{N}\tilde{\mathbf{K}}$; en estos casos se puede aproximar $\tilde{\mathbf{K}} \approx \mathbf{K}$ dado que \mathbf{L} y \mathbf{N} decaen rápidamente. Esquemáticamente, una explicación es

$$\mathbf{L}\tilde{\mathbf{K}} \sim \mathbf{L}(\mathbf{K}_{\text{reales}} + \mathbf{K}_{\text{imágenes}}) = \mathbf{L}\mathbf{K}_{\text{reales}} + \mathbf{L}\mathbf{K}_{\text{imágenes}} = \mathbf{L}\mathbf{K}_{\text{reales}} + (\text{algo muy pequeño}) \approx \mathbf{L}\mathbf{K}_{\text{reales}} \quad (4.73)$$

donde $\mathbf{K}_{\text{reales}}$ es la parte que representa las interacciones con las partículas reales y $\mathbf{K}_{\text{imágenes}}$ es la parte que representa las interacciones con las imágenes, las cuales son mucho más débiles dado que se estudia la región alejada de las paredes.

⁵Para los cálculos se utilizarán relaciones tensoriales que se encuentran en el apéndice.

⁶Explicada en (4.27)

Usando esta aproximación en (4.72),

$$\begin{aligned}
(d_i^{(2)})_p &\simeq w_p - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{pm} w_m + \sum_{k \neq i} (\mathbb{K}_{ik})_{pm} (\mathbb{K}_{ki})_{ml} w_l + \sum_{k \neq i} (\mathbb{L}_{ik})_{pnl} (\mathbb{L}_{ki})_{nl} w_\lambda \\
(d_i^{(2)})_p &= \left(1 + \sum_{k \neq i} \left\{ \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^4 - 2 \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^6 \right\} \right) w_p - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{pm} w_m
\end{aligned} \tag{4.74}$$

Para obtener la última ecuación se han utilizado las ecuaciones (A.1) y (A.2) del apéndice. Con respecto al tensor \mathbb{Q}

$$\begin{aligned}
(\mathbb{Q}_i^{(2)})_{pq} &= \sum_{k \neq i} -(\mathbb{L}_{ik})_{pql} \left[w_l + \sum_{\mu \neq k} -(\tilde{\mathbb{K}}_{k;\mu})_{l\lambda} w_\lambda \right] + \sum_{k \neq i} (\mathbb{N}_{ik})_{pqln} \left[\sum_{\mu \neq k} -(\mathbb{L}_{k\mu})_{ln\lambda} w_\lambda \right] \\
(\mathbb{Q}_i^{(2)})_{pq} &\simeq \sum_{k \neq i} -(\mathbb{L}_{ik})_{pql} w_l + \sum_{k \neq i} (\mathbb{L}_{ik})_{pql} (\tilde{\mathbb{K}}_{k;i})_{l\lambda} w_\lambda - \sum_{k \neq i} (\mathbb{N}_{ik})_{pqln} (\mathbb{L}_{ki})_{ln\lambda} w_\lambda \\
(\mathbb{Q}_i^{(2)})_{pq} &\simeq \sum_{k \neq i} -(\mathbb{L}_{ik})_{pql} w_l + \sum_{k \neq i} (\mathbb{L}_{ik})_{pql} (\mathbb{K}_{ki})_{l\lambda} w_\lambda - \sum_{k \neq i} (\mathbb{N}_{ik})_{pqln} (\mathbb{L}_{ki})_{ln\lambda} w_\lambda
\end{aligned} \tag{4.75}$$

Para obtener la última ecuación nuevamente se consideró solamente el término con $\mu = i$, y además se usó la aproximación para $\tilde{\mathbb{K}}$ en la contracción $(\mathbb{L}_{ik})_{pql} (\tilde{\mathbb{K}}_{k;i})_{l\lambda}$.
 $O^3]$

$$\begin{aligned}
(d_i^{(3)})_p &= w_p + \sum_{k \neq i} -(\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{pl} \left[\left(1 + \sum_{\mu \neq k} \left\{ \left(\frac{a_\mu}{R_{k\mu}} \right)^4 - 2 \left(\frac{a_\mu}{R_{k\mu}} \right)^6 \right\} \right) w_l - \sum_{\mu \neq k} (\tilde{\mathbb{K}}_{k;\mu})_{l\lambda} w_\lambda \right] \\
&+ \sum_{k \neq i} -(\mathbb{L}_{ik})_{pln} \left[\sum_{\mu \neq k} -(\mathbb{L}_{k\mu})_{ln\lambda} w_\lambda + \sum_{\mu \neq k} (\mathbb{L}_{k\mu})_{ln\lambda} (\mathbb{K}_{\mu k})_{n\lambda} w_\lambda \right. \\
&\left. - \sum_{\mu \neq k} (\mathbb{N}_{k\mu})_{ln\lambda\nu} (\mathbb{L}_{\mu k})_{\lambda\nu\gamma} w_\gamma \right]
\end{aligned} \tag{4.76}$$

Para simplificar la expresión anterior se puede, por ejemplo, utilizar las relaciones (A.2) y (A.3). Para hacer la notación más simple se utilizará en adelante la definición⁷ $\Delta_{ik} \equiv a_i/R_{ik}$. De esta manera, al considerar nuevamente sólo los términos con $\mu = i$,

$$(d_i^{(3)})_p = \left(1 + \sum_{k \neq i} [\Delta_{ik}^4 - 2\Delta_{ik}^6] \right) w_p + \sum_{k \neq i} -(\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{pl} w_l + \sum_{k \neq i} (-\Delta_{ik}^4 + 4\Delta_{ik}^6 - 6\Delta_{ik}^8) (\mathbb{K}_{ik})_{pl} w_l \tag{4.77}$$

Para el tensor \mathbb{Q}

⁷Recordar, de todas maneras, que $a_i = a_k$ pues la suspensión es de partículas idénticas.

$$\begin{aligned}
(\mathbb{Q}_i^{(3)})_{ln} &= \sum_{k \neq i} -(\mathbb{L}_{ik})_{lnp} \left[\left(1 + \sum_{\mu \neq k} \Delta_{k\mu}^4 - 2\Delta_{k\mu}^6 \right) w_p - \sum_{\mu \neq k} (\tilde{\mathbb{K}}_{k;\mu})_{p\lambda} w_\lambda \right] \\
&+ \sum_{k \neq i} (\mathbb{N}_{ik})_{lnpq} \left[\sum_{\mu \neq k} -(\mathbb{L}_{k\mu})_{pq\lambda} w_\lambda + \sum_{\mu \neq k} (\mathbb{L}_{k\mu})_{pq\lambda} (\mathbb{K}_{\mu k})_{\lambda\nu} w_\nu - \sum_{\mu \neq k} (\mathbb{N}_{k\mu})_{pq\lambda\nu} (\mathbb{L}_{\mu k})_{\lambda\nu\gamma} w_\gamma \right] \\
(\mathbb{Q}_i^{(3)})_{ln} &= \sum_{k \neq i} (-1 - \Delta_{ik}^4 + 5\Delta_{ik}^6 - 9\Delta_{ik}^8) (\mathbb{L}_{ik})_{lnp} w_p + \sum_{k \neq i} (\mathbb{L}_{ik})_{lnp} (\mathbb{K}_{ki})_{p\lambda} w_\lambda \\
&- \sum_{k \neq i} (\mathbb{N}_{ik})_{lnpq} (\mathbb{L}_{ki})_{pq\lambda} w_\lambda
\end{aligned} \tag{4.78}$$

Se utilizaron las relaciones (A.4) y (A.5), además de considerar $\mu = i$, para obtener la ecuación (4.78). Habiendo explicado ya el método iterativo, se procederá a dar los resultados obtenidos para los siguientes órdenes

$O^4]$

$$\begin{aligned}
(d_i^{(4)})_p &= \left(1 + \sum_{k \neq i} \Delta_{ik}^4 - 2\Delta_{ik}^6 + \Delta_{ik}^8 - 6\Delta_{ik}^{10} + 16\Delta_{ik}^{12} - 18\Delta_{ik}^{14} \right) w_p + \sum_{k \neq i} -(\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{pl} w_l \\
&+ \sum_{k \neq i} (-\Delta_{ik}^4 + 4\Delta_{ik}^6 - 6\Delta_{ik}^8) (\mathbb{K}_{ik})_{p\lambda} w_\lambda
\end{aligned} \tag{4.79}$$

$$\begin{aligned}
(\mathbb{Q}_i^{(4)})_{pq} &= \sum_{k \neq i} (-1 - \Delta_{ik}^4 + 5\Delta_{ik}^6 - 9\Delta_{ik}^8) (\mathbb{L}_{ik})_{pq\gamma} w_\gamma + \sum_{k \neq i} (1 + \Delta_{ik}^4 - 4\Delta_{ik}^6 + 6\Delta_{ik}^8) (\mathbb{L}_{ik})_{pql} (\mathbb{K}_{ki})_{l\gamma} w_\gamma \\
&+ \sum_{k \neq i} (-1 - \Delta_{ik}^4 + 5\Delta_{ik}^6 - 9\Delta_{ik}^8) (\mathbb{N}_{ik})_{pqln} (\mathbb{L}_{ki})_{ln\gamma} w_\gamma
\end{aligned} \tag{4.80}$$

$O^5]$

$$\begin{aligned}
(d_i^{(5)})_m &= \left(1 + \sum_{k \neq i} \Delta_{ik}^4 - 2\Delta_{ik}^6 + \Delta_{ik}^8 - 6\Delta_{ik}^{10} + 16\Delta_{ik}^{12} - 18\Delta_{ik}^{14} \right) w_m + \sum_{k \neq i} -(\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{ml} w_l \\
&+ \sum_{k \neq i} (-\Delta_{ik}^4 + 4\Delta_{ik}^6 - 7\Delta_{ik}^8 + 8\Delta_{ik}^{10} - 30\Delta_{ik}^{12} + 60\Delta_{ik}^{14} - 54\Delta_{ik}^{16}) (\mathbb{K}_{ik})_{ml} w_l
\end{aligned} \tag{4.81}$$

Como se puede apreciar, hasta el momento ninguna recurrencia parece surgir. Por lo tanto, se procederá a calcular el vector dipolar promedio $\langle \vec{d} \rangle$ usando la expresión (4.81) como aproximación al verdadero vector \vec{d} .

$$\begin{aligned}
\therefore \vec{d}_i &\approx \vec{w} + \sum_{k \neq i} (\Delta_{ik}^4 - 2\Delta_{ik}^6 + \Delta_{ik}^8 - 6\Delta_{ik}^{10} + 16\Delta_{ik}^{12} - 18\Delta_{ik}^{14}) \vec{w} \\
&+ \sum_{k \neq i} -\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + \sum_{k \neq i} (-\Delta_{ik}^4 + 4\Delta_{ik}^6 - 7\Delta_{ik}^8 + 8\Delta_{ik}^{10} - 30\Delta_{ik}^{12} + 60\Delta_{ik}^{14} - 54\Delta_{ik}^{16}) \mathbb{K}_{ik} \vec{w}
\end{aligned} \tag{4.82}$$

Aplicando lo aprendido para el cálculo de promedios,

$$\langle \vec{d} \rangle \approx \vec{w} + n \int g^{(2)}(\vec{X}) A(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + n \int g^{(2)}(\vec{X}) B(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} - n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} h^{(2)}(\vec{X}) \mathbb{K}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \tag{4.83}$$

donde

$$A(X) = \left(\frac{a}{X}\right)^4 - 2\left(\frac{a}{X}\right)^6 + \left(\frac{a}{X}\right)^8 - 6\left(\frac{a}{X}\right)^{10} + 16\left(\frac{a}{X}\right)^{12} - 18\left(\frac{a}{X}\right)^{14}$$

$$B(X) = -\left(\frac{a}{X}\right)^4 + 4\left(\frac{a}{X}\right)^6 - 7\left(\frac{a}{X}\right)^8 + 8\left(\frac{a}{X}\right)^{10} - 30\left(\frac{a}{X}\right)^{12} + 60\left(\frac{a}{X}\right)^{14} - 54\left(\frac{a}{X}\right)^{16}$$

Nuevamente se usará la aproximación para $g^{(2)}$ y $h^{(2)}$ de considerar sólo volumen excluido.

$$g^{(2)}(\vec{X}) = \begin{cases} 0 & X < 2a \\ 1 & X \geq 2a \end{cases} ; \quad h^{(2)}(\vec{X}) = \begin{cases} -1 & X < 2a \\ 0 & X \geq 2a \end{cases}$$

con lo cual se obtiene

$$\langle \vec{d} \rangle \approx \vec{w} + n \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} A(X) X dX d\phi \vec{w} + n \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} B(X) \mathbb{K}(\vec{X}) X dX d\phi \vec{w} - n \int_0^{2\pi} \int_0^{2a} (-1) \mathbb{K}(\vec{X}) X dX d\phi \vec{w} \quad (4.84)$$

Al integrar en el ángulo las dos últimas integrales se anulan⁸. Además,

$$\int_{2a}^{\infty} A(X) X dX = 0,09462076823 a^2 \equiv \chi a^2 \quad (4.85)$$

De este resultado⁹ se obtiene, por lo tanto,

$$\begin{aligned} \langle \vec{d} \rangle &= \vec{w} + n 2\pi \chi a^2 \vec{w} = \vec{w} + (n\pi a^2) 2\chi \vec{w} \\ \langle \vec{d} \rangle &= \vec{w} + 2\chi \Phi \vec{w} \end{aligned} \quad (4.86)$$

con lo cual se tiene que

$$\begin{aligned} \langle \vec{U} \rangle &= 2\langle \vec{d} \rangle - \vec{w} \\ \langle \vec{U} \rangle &= 2(\vec{w} + 2\chi \Phi \vec{w}) - \vec{w} \\ \langle \vec{U} \rangle &= \vec{w} + 4\chi \Phi \vec{w} \\ \langle \vec{U} \rangle &\approx \vec{w} (1 + 0,378\Phi) \end{aligned} \quad (4.87)$$

Resulta natural comparar este resultado con aquel obtenido con el modelo dipolar

$$\langle \vec{U} \rangle^{(d)} = \vec{w} (1 + \ln(5/3)\Phi) \approx \vec{w} (1 + 0,511\Phi) \quad (4.88)$$

Importante conclusión se obtiene, pues se aprecia que los aportes del modelo cuadrupolar son del mismo orden de magnitud que el valor que entrega el modelo dipolar; aunque difieren, ambos modelos entregan resultados bastante cercanos. Esto conduce a pensar que el modelo dipolar logra describir el comportamiento colectivo de una suspensión; sin embargo, si se desea precisión, el resultado anterior indica que las correcciones dadas por el modelo cuadrupolar no son despreciables. Interesante sería saber si el siguiente término en la expansión para el vector \vec{d} (algo así como un

⁸Notar, de todas maneras, que dichas integrales son convergentes en X.

⁹Se muestran tantos decimales simplemente para comparar con un resultado que aparece más adelante.

“modelo octupolar”) es despreciable en su aporte o no; sin embargo, la complejidad de los cálculos y lo costoso que son computacionalmente guiaron el desarrollo de esta tesis hacia otros rumbos.

Interesante resulta comparar los resultados obtenidos con el caso en tres dimensiones, donde se tiene que la velocidad terminal de una partícula obedece la ley fenomenológica de *Richardson-Zaki* [20]

$$\langle U_y \rangle = U_s(1 - \Phi)^n$$

donde U_y es la componente de la velocidad paralela a la gravedad, U_s corresponde a la velocidad terminal de una sola partícula (llamada también *Velocidad de Stokes*), el exponente n depende del número de Reynolds de una partícula (Re_p , que se obtiene usando el radio a de una partícula y U_s como la longitud característica y la velocidad característica, respectivamente) y aproximadamente $n \simeq 5,5$.

Esta ley indica que la velocidad terminal es una función monótonamente decreciente de Φ , *i.e.*, una suspensión sedimenta más lentamente que una sola partícula. Se puede explicar esto considerando que el flujo descendente producido por la partícula al sedimentar debe compensarse con un contraflujo ascendente debido a la existencia de paredes confinantes [35]. Este contraflujo lentifica la sedimentación. Sorprendentemente, la predicción (4.87) indica que las interacciones hidrodinámicas de campo lejano conducen a una velocidad terminal que es una función *creciente* con Φ , a diferencia del caso en tres dimensiones; se ha de recordar, sin embargo, que en el cálculo desarrollado en este capítulo no se toman en cuenta el efecto de las dos paredes verticales paralelas a la gravedad (y que ejercen una fuerza sobre las partículas, desacelerándolas) ni las fuerzas de campo cercano (*i.e.*, de lubricación). Una importante característica que ambos resultados (dos y tres dimensiones) comparten es que son expresiones *universales*, es decir, no dependen de la geometría del contenedor o su tamaño [35] (considerando, como se mencionó anteriormente, que el contenedor es suficientemente grande como para considerar partículas lejanas a las paredes y despreciar la pequeña zona de la suspensión cercana a las paredes).

Addendum

Para verificar qué tan bueno es el resultado para la velocidad terminal utilizando la aproximación hasta quinto orden de \vec{d} , se procedió a calcular el orden sexto. El resultado que se obtuvo es

$$\begin{aligned} A(X) &= \left(\frac{a}{X}\right)^4 - 2\left(\frac{a}{X}\right)^6 + \left(\frac{a}{X}\right)^8 - 6\left(\frac{a}{X}\right)^{10} + 17\left(\frac{a}{X}\right)^{12} - 28\left(\frac{a}{X}\right)^{14} + 48\left(\frac{a}{X}\right)^{16} - 134\left(\frac{a}{X}\right)^{18} \\ &\quad + 216\left(\frac{a}{X}\right)^{20} - 162\left(\frac{a}{X}\right)^{22} \\ \int_{2a}^{\infty} A(X) X dX &= 0,09463449659 a^2 \end{aligned} \quad (4.89)$$

Como se puede apreciar, este resultado para la integral de $A(X)$ difiere muy poco del que aparece en (4.85). Utilizando el resultado (4.89) para calcular $\langle \vec{U} \rangle$ se obtiene el mismo resultado anterior, considerando hasta el tercer decimal.

Capítulo 5

Las fluctuaciones de velocidad

Resumen

Un tema que ha suscitado mucho interés en la comunidad científica y que todavía no posee explicación definitiva es el asunto de las fluctuaciones de la velocidad para una suspensión sedimentando bajo el efecto de la gravedad en tres dimensiones. Esto es más que suficiente motivación para analizar este tema en el sistema cuasi-bidimensional estudiado. A partir del modelo obtenido en el capítulo 2, se procede a calcular la desviación estándar utilizando tanto el modelo dipolar como el cuadrupolar, comparando además sus predicciones. Se presenta un resumen de los resultados para la velocidad terminal y desviación estándar correspondientes a cada modelo, finalizando el capítulo con un análisis del método utilizado en la presente tesis.

5.1. La desviación estándar de la Velocidad

A medida que una partícula sedimenta, la velocidad terminal difiere de aquella que alcanzaría en un medio sin la presencia de otras partículas debido a las interacciones hidrodinámicas entre ellas. Este fenómeno fue estudiado y cuantificado en la sección anterior.

Otro fenómeno importante a estudiar son las desviaciones de la velocidad en relación a este promedio. Como se mencionó en la introducción, simulaciones numéricas en tres dimensiones sin considerar una pared en el fondo del contenedor condujeron a fluctuaciones divergentes, mientras que aquellas que tomaban en cuenta el fondo entregaban como resultados fluctuaciones convergentes [21, 23, 29, 35]. Esto motiva calcular las fluctuaciones de velocidad para el sistema estudiado en esta tesis, verificar si es que las imágenes usadas para representar las paredes del contenedor permiten obtener un resultado finito, y ver de qué parámetros depende este resultado.

En esta sección se procederá a calcular las fluctuaciones de la velocidad terminal con respecto a su valor promedio, *i.e.*, se calculará la *desviación estándar*, definida como

$$\sigma(\vec{U}) = \sqrt{\langle \vec{U}^2 \rangle - \langle \vec{U} \rangle^2} \quad (5.1)$$

Por lo tanto, se necesita calcular $\langle \vec{U}^2 \rangle$ pues $\langle \vec{U} \rangle$ ya fue calculada en el capítulo 4. Se tiene que

$$\begin{aligned}\vec{U}_i &= 2\vec{d}_i - \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} \\ \vec{U}_i &= 2\vec{d}_i - \vec{w}\end{aligned}\quad (5.2)$$

Luego,

$$\vec{U}_i^2 = 4\vec{d}_i^2 + \vec{w}^2 - 4\vec{d}_i \cdot \vec{w} \quad (5.3)$$

Al calcular el promedio de la ecuación (5.3),

$$\langle \vec{U}^2 \rangle = 4\langle \vec{d}^2 \rangle + \vec{w}^2 - 4\langle \vec{d} \rangle \cdot \vec{w} \quad (5.4)$$

Ya se ha calculado $\langle \vec{d} \rangle$, pero falta conocer el valor de $\langle \vec{d}^2 \rangle$.

5.1.1. Mediante el modelo dipolar

Se empezará el cálculo utilizando el modelo dipolar. En dicho modelo se obtuvo (ver ecuación (4.55))

$$\vec{d}_i = \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w} \quad (5.5)$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned}\vec{d}_i^2 &= \left(\vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w} \right) \left(\vec{w} - \sum_{l \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,l} \vec{w} + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{l \neq i} (-1)^p (\mathbb{K}_{il})^p \vec{w} \right) \\ &= \vec{w}^2 - 2\vec{w} \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} + 2\vec{w} \sum_{k \neq i} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} \tilde{\mathbb{K}}_{i,l} \vec{w} \\ &\quad - 2 \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} (\mathbb{K}_{il})^p \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{q+p} (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w} (\mathbb{K}_{il})^p \vec{w}\end{aligned}\quad (5.6)$$

Se aprovechará de usar la simetría de \mathbb{K} para hacer $\mathbb{K} \vec{w} = \vec{w} \mathbb{K}$. Luego, se tiene que

$$\begin{aligned}\vec{d}_i^2 &= \vec{w}^2 - 2\vec{w} \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} + 2\vec{w} \sum_{k \neq i} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} \tilde{\mathbb{K}}_{i,l} \vec{w} \\ &\quad - 2 \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} (\mathbb{K}_{il})^p \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{q+p} \vec{w} (\mathbb{K}_{ik})^q (\mathbb{K}_{il})^p \vec{w}\end{aligned}\quad (5.7)$$

Se deben separar los términos de las sumas con $l = k$ de aquellos con $l \neq k$. Se puede utilizar la aproximación explicada en (4.27) para el tensor $\tilde{\mathbb{K}}$, que corresponde a considerar $(\tilde{\mathbb{K}}_{i,k})^c \approx (\mathbb{K}_{ik})^c$ con $c \geq 2$, pues las imágenes ejercen una influencia muy débil. No se realiza la misma aproximación para el término $\tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} \tilde{\mathbb{K}}_{i,l} \vec{w}$ pues dichos tensores están evaluados en distintos vectores.

$$\begin{aligned}
\vec{d}_i^2 &= \vec{w}^2 - 2\vec{w} \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + 2\vec{w} \sum_{k \neq i} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w} + \sum_{k \neq i} \vec{w} (\mathbb{K}_{ik})^2 \vec{w} - 2 \sum_{k \neq i} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \vec{w} (\mathbb{K}_{ik})^{p+1} \vec{w} \\
&+ \sum_{k \neq i} \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{q+p} \vec{w} (\mathbb{K}_{ik})^{p+q} \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i, k} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} \tilde{\mathbb{K}}_{i;l} \vec{w} - 2 \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i, k} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} (\mathbb{K}_{il})^p \vec{w} \\
&+ \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i, k} \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{q+p} \vec{w} (\mathbb{K}_{ik})^q (\mathbb{K}_{il})^p \vec{w} \\
\vec{d}_i^2 &= \vec{w}^2 - 2\vec{w} \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} \\
&+ \vec{w} \sum_{k \neq i} \left\{ 2 \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q + (\mathbb{K}_{ik})^2 - 2 \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p (\mathbb{K}_{ik})^{p+1} + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} (\mathbb{K}_{ik})^{p+q} \right\} \vec{w} \\
&+ \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i, k} \left\{ \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} \tilde{\mathbb{K}}_{i;l} - 2 \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} (\mathbb{K}_{il})^p + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w} (\mathbb{K}_{ik})^q (\mathbb{K}_{il})^p \right\} \vec{w} \\
\vec{d}_i^2 &= \vec{w}^2 - 2\vec{w} \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + \vec{w} \sum_{k \neq i} A(\vec{R}_{ik}) \vec{w} + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i, k} B(\vec{R}_i, \vec{R}_k, \vec{R}_l) \vec{w} \tag{5.8}
\end{aligned}$$

Es decir, en la ecuación (5.8) se han definido

$$A(\vec{R}_{ik}) \equiv 2 \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q + (\mathbb{K}_{ik})^2 - 2 \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p (\mathbb{K}_{ik})^{p+1} + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} (\mathbb{K}_{ik})^{p+q} \tag{5.9}$$

$$B(\vec{R}_i, \vec{R}_k, \vec{R}_l) \equiv \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} \tilde{\mathbb{K}}_{i;l} - 2 \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} (\mathbb{K}_{il})^p + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w} (\mathbb{K}_{ik})^q (\mathbb{K}_{il})^p \tag{5.10}$$

Para calcular el promedio se procede de la misma forma que en el cálculo realizado en el capítulo 4, *i.e.*, se multiplica la ecuación (5.8) por $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N$ y además se integra en todas las variables, usando la función distribución configuracional de partículas $\rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)$ como peso.

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{\Omega} \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) (\text{ecuación (5.8)}) d^{2N} R$$

Se obtiene la siguiente ecuación

$$\begin{aligned}
\langle \vec{d}^2 \rangle &= \vec{w}^2 - 2\vec{w} \frac{1}{N} \int \sum_{i=1}^N \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) d^2 R_1 \dots d^2 R_N \vec{w} \\
&+ \vec{w} \frac{1}{N} \int \sum_{i=1}^N \sum_{k \neq i} A(\vec{R}_{ik}) \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) d^2 R_1 \dots d^2 R_N \vec{w} \\
&+ \frac{1}{N} \int \sum_{i=1}^N \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i, k} B(\vec{R}_i, \vec{R}_k, \vec{R}_l) \rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) d^2 R_1 \dots d^2 R_N \vec{w} \tag{5.11}
\end{aligned}$$

Como las partículas son indistinguibles entre sí, se puede elegir $i = 1, k = 2, l = 3$ y multiplicar por el número de veces que se suma en i, k y l , sin pérdida de generalidad (se usará la notación $\rho(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) = \rho(1, \dots, N)$).

$$\begin{aligned}
\langle \vec{d}^2 \rangle &= \vec{w}^2 - 2\vec{w} \frac{1}{N} \int \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \left[\underbrace{N(N-1) \int \rho(1, \dots, N) d^2 R_3 \dots d^2 R_N}_{\rho^{(2)}(1,2)} \right] d^2 R_1 d^2 R_2 \vec{w} \\
&+ \vec{w} \frac{1}{N} \int A(\vec{R}_{12}) \left[\underbrace{N(N-1) \int \rho(1, \dots, N) d^2 R_3 \dots d^2 R_N}_{\rho^{(2)}(1,2)} \right] d^2 R_1 d^2 R_2 \vec{w} \\
&+ \frac{1}{N} \int B(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3) \left[\underbrace{N(N-1)(N-2) \int \rho(1, \dots, N) d^2 R_4 \dots d^2 R_N}_{\rho^{(3)}(1,2,3)} \right] d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \vec{w}
\end{aligned}$$

Bajo los mismos supuestos usados en el capítulo 4 (en la zona lejana a las paredes se supone una suspensión homogénea) se puede escribir $\rho^{(2)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = n^2 g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \equiv n^2 g_{12}^{(2)}$ y $\rho^{(3)}(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3) = n^3 g^{(3)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2, \vec{R}_1 - \vec{R}_3) \equiv n^3 g_{12,13}^{(3)}$. Con esto se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle \vec{d}^2 \rangle &= \vec{w}^2 - 2\vec{w} \frac{n^2}{N} \int \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} g_{12}^{(2)} d^2 R_1 d^2 R_2 \vec{w} + \vec{w} \frac{n^2}{N} \int A(\vec{R}_{12}) g_{12}^{(2)} d^2 R_1 d^2 R_2 \vec{w} \\
&+ \frac{n^3}{N} \int B(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3) g_{12,13}^{(3)} d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \vec{w} \tag{5.12}
\end{aligned}$$

Se procede a estudiar cada término por separado.

$I_1]$

Esta integral ya es convergente, pero se realizará un manejo algebraico análogo a aquél realizado para la integral en (4.21) para soslayar la dependencia en la geometría y tamaño del sistema. Dado que $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{X} - \vec{Y}\| \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 Y = 0$, se puede escribir

$$\begin{aligned}
\int \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) g^{(2)}(\vec{R}_{12}) d^2 R_1 d^2 R_2 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{R_{12} \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) g^{(2)}(\vec{R}_{12}) d^2 R_1 d^2 R_2 \\
&- \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{R_{12} \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{R_{12} \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \underbrace{(g^{(2)}(\vec{R}_{12}) - 1)}_{h^{(2)}(\vec{R}_{12})} d^2 R_1 d^2 R_2 \\
&\simeq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{R_{12} \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{R}_{12}) h^{(2)}(\vec{R}_{12}) d^2 R_1 d^2 R_2
\end{aligned}$$

Haciendo el cambio de variable de integración, la última expresión obtenida se puede escribir

como

$$\begin{aligned} & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{R_{12} \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{R}_{12}) h^{(2)}(\vec{R}_{12}) d^2 R_{12} \underbrace{\int d^2 R_2}_{= \text{área } A} \\ &= A \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{R_{12} \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{R}_{12}) h^{(2)}(\vec{R}_{12}) d^2 R_{12} \end{aligned} \quad (5.13)$$

$h^{(2)}$ es la función correlación de pares; se recuerda que, dado que esta función decae rápidamente a cero a medida que la separación entre las partículas crece, sólo configuraciones con partículas cercanas han de considerarse. Para este tipo de configuraciones se puede realizar la aproximación $\widetilde{\mathbb{K}} \approx \mathbb{K}$, la cual se utilizó en el análisis anterior.

Recordando que $A/N = 1/n$, se tiene que el segundo término al lado derecho de la ecuación (5.12) se puede escribir como

$$-2n\vec{w} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{R_{12} \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{R}_{12}) h^{(2)}(\vec{R}_{12}) d^2 R_{12} \vec{w} \quad (5.14)$$

El orden de magnitud de esta integral se puede obtener de la misma manera que en el cálculo para la velocidad terminal; como el principal aporte del integrando es dado por $\|\vec{R}_{12}\| = R_{12} \sim O(a)$, se usa un escalamiento que represente esta longitud característica: $\vec{R}_{12} = a\vec{X}$.

$$-2n\vec{w}a^2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{X}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \quad (5.15)$$

Como el integrando decae a cero con X y es $O(1)$ para $X \sim O(1)$, la integral es una constante de orden $O(1)$. Recordando la definición $\Phi = n\pi a^2$, se tiene entonces que este término es de orden $O(\Phi)$.

$I_2]$ Notando que $A(\vec{R}_{12})$ está conformada por potencias de \mathbb{K} , se tiene que es una función que decae rápidamente con la distancia y es $O(1)$ para $R_{12} \sim O(a)$; además, $g^{(2)}$ es $O(1)$ para $R_{12} \sim O(a)$ y converge a uno. Conviene entonces realizar el mismo cambio de variables usado en (5.13): $d^2 R_1 d^2 R_2 = d^2 R_{12} d^2 R_2 = a^2 d^2 X d^2 R_2$ (el último diferencial de área $d^2 R_2$ entregará un área, de la misma manera que en el desarrollo para I_1). Así,

$$\begin{aligned} \vec{w} \frac{n^2}{N} \int A(\vec{R}_{12}) g^{(2)}(\vec{R}_{12}) d^2 R_1 d^2 R_2 \vec{w} &= n\vec{w} \int A(\vec{R}_{12}) g^{(2)}(\vec{R}_{12}) d^2 R_{12} \vec{w} \\ &= na^2 \vec{w} \int A(\vec{X}) g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \sim O(\Phi) \end{aligned} \quad (5.16)$$

$I_3]$ Este término surgió de las sumas dobles que aparecen en la expresión para \vec{d}^2 , y en forma similar al caso del cálculo de la velocidad terminal, se mostrará que aporta resultados de orden $O(\Phi^2)$. Hay que analizar

$$\frac{n^3}{N} \int B(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3) g_{12,13}^{(3)} d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \quad (5.17)$$

Mejor resulta trabajar con la expresión alternativa de $g_{12,13}^{(3)}$,

$$\frac{n^3}{N} \int B(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3) \left[1 + h^{(2)}(\vec{R}_{12}) + h^{(2)}(\vec{R}_{13}) + h^{(2)}(\vec{R}_{23}) + h^{(3)}(\vec{R}_{12}, \vec{R}_{13}) \right] d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \quad (5.18)$$

Conviene escribir explícitamente la expresión para B y estudiar por separado cada término. Se reemplaza entonces su definición dada en (5.10),

$$\begin{aligned} & \frac{n^3}{N} \int \left[\widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}_{1;3} - 2 \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} (\mathbb{K}_{13})^p + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w} (\mathbb{K}_{12})^q (\mathbb{K}_{13})^p \right] \\ & \quad \left[1 + h^{(2)}(\vec{R}_{12}) + h^{(2)}(\vec{R}_{13}) + h^{(2)}(\vec{R}_{23}) + h^{(3)}(\vec{R}_{12}, \vec{R}_{13}) \right] d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 = \\ & \frac{n^3}{N} \int \left[\underbrace{\widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}_{1;3}}_{a_1} - 2 \underbrace{\sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} (\mathbb{K}_{13})^p}_{a_2} + \underbrace{\sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w} (\mathbb{K}_{12})^q (\mathbb{K}_{13})^p}_{a_3} \right] + \\ & \left[\underbrace{\widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}_{1;3}}_{b_1} - 2 \underbrace{\sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} (\mathbb{K}_{13})^p}_{b_2} + \underbrace{\sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w} (\mathbb{K}_{12})^q (\mathbb{K}_{13})^p}_{b_3} \right] h^{(2)}(\vec{R}_{13}) + \\ & \left[\widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}_{1;3} - 2 \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} (\mathbb{K}_{13})^p + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w} (\mathbb{K}_{12})^q (\mathbb{K}_{13})^p \right] h^{(2)}(\vec{R}_{23}) + \\ & \left[\widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}_{1;3} - 2 \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p \widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} (\mathbb{K}_{13})^p + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w} (\mathbb{K}_{12})^q (\mathbb{K}_{13})^p \right] h^{(3)}(\vec{R}_{12}) \end{aligned}$$

Las integrales que así surgen se analizan término a término.

(a_1)

$$\begin{aligned} \int \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_3) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \underbrace{\left\{ \int_{R_{12} \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) d^2 R_2 \right\}}_{=0} \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_3) d^2 R_1 d^2 R_3 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5.19)$$

Se recuerda que la integral que se anula en la ecuación anterior fue analizada al final del capítulo 3.

(a_2) Un análisis análogo para $\widetilde{\mathbb{K}}_{1;2} \vec{w} (\mathbb{K}_{13})^p$ entrega el mismo resultado.

(a_3) Como $(\mathbb{K}_{12})^q (\mathbb{K}_{13})^p$ decaen muy rápido, se puede escalar de la siguiente forma:
 $\vec{R}_{12} = a\vec{X}; \vec{R}_{13} = a\vec{Y}$ (considerando que el aporte principal es para $R \sim O(a)$). Así,

$$\begin{aligned}
& \frac{n^3}{N} \int \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w}(\mathbb{K}_{12})^q (\mathbb{K}_{13})^p d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \\
&= \frac{n^3}{N} \int \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w}(\mathbb{K}(a\vec{X}))^q (\mathbb{K}(a\vec{Y}))^p a^2 d^2 X a^2 d^2 Y \int d^2 R_3 \\
&= (na^2)^2 \int \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} \vec{w}(\mathbb{K}(a\vec{X}))^q (\mathbb{K}(a\vec{Y}))^p d^2 X d^2 Y \quad (5.20)
\end{aligned}$$

Como el integrando es orden uno, este término es $O(\Phi^2)$.

Corresponde a continuación analizar las integrales que tienen a la función $h^{(2)}(\vec{R}_{13})$ en su integrando. Como esta función decae rápidamente con R_{13} , se han de considerar solamente configuraciones en que $R_{13} \sim O(a)$.

La primera integral que surge (término con b_1) es

$$\begin{aligned}
& \int \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_3) h^{(2)}(\vec{R}_{13}) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \left\{ \overbrace{\int_{R_{12} \geq \epsilon} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) d^2 R_2}^{=0} \right\} \vec{w} \widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_3) h^{(2)}(\vec{R}_{13}) d^2 R_1 d^2 R_3 = 0 \quad (5.21)
\end{aligned}$$

El mismo análisis se puede hacer para la segunda integral (término con b_2), obteniéndose el mismo resultado; para el tercer término con b_3 se puede escalar de la misma manera utilizada para obtener la expresión (5.20), concluyendo que es $O(\Phi^2)$.

Con respecto a las integrales que aparecen con la función $h^{(2)}(\vec{R}_{23})$ en su integrando, hay que considerar $R_{23} \sim O(a)$. Si la partícula 1 estuviese alejada, como 2 y 3 están cerca, se tendrá que $R_{12}, R_{13} \gg a$; por lo tanto, cada uno de los términos en la expresión (5.17) serían muy pequeños (recordar que decaen rápidamente con la separación entre las partículas). Esto indica que hay que considerar que las tres partículas están cercanas. Esto permite aproximar $\widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \approx \mathbb{K}(\vec{R}_{12})$ y $\widetilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_3) \approx \mathbb{K}(\vec{R}_{13})$. Es fácil darse cuenta que entonces B pasará a depender de la distancia relativa entre las partículas, no de la posición de cada una en particular. Luego, el siguiente análisis permite concluir que este término también es $O(\Phi^2)$.

$$\frac{n^3}{N} \int B(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3) h^{(2)}(\vec{R}_{23}) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \simeq \frac{n^3}{N} \int B(\vec{R}_{12}, \vec{R}_{13}) h^{(2)}(\vec{R}_{23}) d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 R_3 \quad (5.22)$$

Escribiendo $\vec{R}_{12} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2 = \vec{R}_1 - \vec{R}_3 + \vec{R}_3 - \vec{R}_2 = \vec{R}_{13} - \vec{R}_{23}$, más un adecuado cambio de variables, la expresión en (5.17) queda

$$\frac{n^3}{N} \int B(\vec{R}_{13} - \vec{R}_{23}, \vec{R}_{13}) h^{(2)}(\vec{R}_{23}) d^2 R_{13} d^2 R_{23} \underbrace{\int d^2 R_3}_{=A}$$

Escalando con $\vec{R}_{13} = a\vec{X}$ y $\vec{R}_{23} = a\vec{Y}$,

$$(na^2)^2 \int B(\vec{X} - \vec{Y}, \vec{X}) h^{(2)}(\vec{Y}) d^2 X d^2 Y \sim O(\Phi^2)$$

Aún más directo resulta analizar las integrales que involucran a $h^{(3)}(\vec{R}_{12}, \vec{R}_{13})$, pues sólo se ha de considerar configuraciones con las tres partículas cercanas de manera que la función no sea despreciable. El mismo argumento anterior conduce a la misma conclusión.

En resumen, habiendo analizado cuidadosamente las integrales que surgen de (5.18), se ha concluido que la expresión (5.18) aporta términos $O(\Phi^2)$ que son despreciables para suspensiones diluidas como las tratadas en este estudio.

Gracias a los análisis anteriores, la ecuación a estudiar (cambiando el nombre de la variable de integración \vec{R}_{12} por \vec{X}) es

$$\begin{aligned} \langle \vec{d}^2 \rangle &= \vec{w}^2 - 2n\vec{w} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{X}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + n\vec{w} \int A(\vec{X}) g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + O(\Phi^2) \\ &= \vec{w}^2 - 2n\vec{w} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{X}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + 2n\vec{w} \int \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}(\vec{X}))^q g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\ &+ n\vec{w} \int (\mathbb{K}(\vec{X}))^2 g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} - 2n\vec{w} \int \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p (\mathbb{K}(\vec{X}))^{p+1} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\ &+ n\vec{w} \int \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{p+q} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} + O(\Phi^2) \end{aligned} \quad (5.23)$$

Para los cálculos que siguen, se usarán las mismas aproximaciones para $g^{(2)}$ y $h^{(2)}$, es decir,

$$g^{(2)}(\vec{X}) = \begin{cases} 0 & X < 2a \\ 1 & X \geq 2a \end{cases} ; \quad h^{(2)}(\vec{X}) = \begin{cases} -1 & X < 2a \\ 0 & X \geq 2a \end{cases}$$

Se procederá a calcular cada término de (5.23) por separado.

Primero,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} \mathbb{K}(\vec{X}) h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{2\pi} \int_{\epsilon}^{2a} \mathbb{K}(\vec{X}) (-1) X dX d\phi = 0 \quad (5.24)$$

La última igualdad se debe a la propiedad $\int_0^{2\pi} \mathbb{K}(\vec{X}) d\phi = 0$.

Segundo,

$$\begin{aligned}
2n\vec{w} \int \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}(\vec{X}))^q g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} &= 2n\vec{w} \int \sum_{q=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2q} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\
&- 2n\vec{w} \int \sum_{q=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2q+1} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\
&= 2n \vec{w} \mathbb{I} \vec{w} \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \sum_{q=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} X dX d\phi \\
&- 2n \vec{w} \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \sum_{q=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} \mathbb{K}(\vec{X}) X dX d\phi \vec{w}
\end{aligned} \tag{5.25}$$

Para la última igualdad se utilizó la relación $(\mathbb{K}_{ik})^2 = \left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^4 \mathbb{I}$. La segunda integral se anula al integrar en el ángulo, por lo que la expresión (5.25) es igual a

$$\begin{aligned}
2n \vec{w}^2 \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \sum_{q=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} X dX d\phi &= 2n \vec{w}^2 \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{X}{a}\right)^4 - 1} X dX d\phi \\
&= (n\pi a^2) \vec{w}^2 \ln\left(\frac{5}{3}\right) = \Phi \ln\left(\frac{5}{3}\right) \vec{w}^2
\end{aligned} \tag{5.26}$$

Tercero,

$$\begin{aligned}
n\vec{w} \int (\mathbb{K}(\vec{X}))^2 g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} &= n\vec{w} \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^4 \mathbb{I} X dX d\phi \vec{w} \\
&= n\pi a^2 \vec{w}^2 \frac{1}{4} = \Phi \frac{\vec{w}^2}{4}
\end{aligned} \tag{5.27}$$

Cuarto,

$$\begin{aligned}
-2n\vec{w} \int \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p (\mathbb{K}(\vec{X}))^{p+1} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} &= -2n\vec{w} \int \sum_{p=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2p+1} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\
&+ 2n\vec{w} \int \sum_{p=2}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2p} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w}
\end{aligned} \tag{5.28}$$

La primera integral se anula pues $(\mathbb{K})^{2p+1}$ es proporcional a \mathbb{K} . Luego, se tiene

$$\begin{aligned}
0 + 2n\vec{w} \int \sum_{p=2}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2p} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} &= 2n \vec{w} \mathbb{I} \vec{w} \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \sum_{p=2}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4p} X dX d\phi \\
&= 2n \vec{w}^2 \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4p} X dX d\phi \\
&- 2n \vec{w}^2 \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^4 X dX d\phi
\end{aligned} \tag{5.29}$$

Estas dos integrales ya han sido calculadas en (5.26) y (5.27). Es fácil obtener entonces que el resultado de (5.29) es

$$\Phi \ln\left(\frac{5}{3}\right) \vec{w}^2 - \frac{\Phi}{2} \vec{w}^2 \quad (5.30)$$

Quinto,

$$\begin{aligned} & n\vec{w} \int \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^{p+q} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{p+q} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\ &= n\vec{w} \int \left\{ \sum_{q=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2q} - \sum_{q=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2q+1} \right\} \left\{ \sum_{p=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2p} - \sum_{p=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{X}))^{2p+1} \right\} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\ &= n\vec{w} \int \left\{ \sum_{q=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} \mathbb{I} - \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4p} \mathbb{K}(\vec{X}) \right\}^2 g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\ &= n\vec{w} \int \left\{ \left(\sum_{q=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} \right)^2 \mathbb{I} - \underbrace{2 \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4q} \left(\frac{a}{X}\right)^{4p} \mathbb{K}(\vec{X})}_{\text{este término se anula}} + \left(\sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{a}{X}\right)^{4p} \right)^2 \left(\frac{a}{X}\right)^4 \mathbb{I} \right\} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \vec{w} \\ &= n\vec{w}^2 \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \left\{ \left(\frac{1}{\left(\frac{X}{a}\right)^4 - 1} \right)^2 - \left(\frac{1}{\left(\frac{X}{a}\right)^4 - 1} \right)^2 \left(\frac{a}{X}\right)^4 \right\} X dX d\phi \\ &= n\vec{w}^2 2\pi \int_{2a}^{\infty} \left[\frac{X}{\left(\left(\frac{X}{a}\right)^4 - 1\right)^2} - \frac{X}{\left(\left(\frac{X}{a}\right)^4 - 1\right)^2} \left(\frac{a}{X}\right)^4 \right] dX \\ &= \Phi \left[\frac{1}{2} \ln\left(\frac{5}{3}\right) - \frac{1}{4} \right] \vec{w}^2 \quad (5.31) \end{aligned}$$

Finalmente, al reunir los resultados (5.24), (5.26), (5.27), (5.30) y (5.31) se obtiene

$$\langle \vec{d}^2 \rangle = \vec{w}^2 + \Phi \left[-\frac{1}{2} + \frac{5}{2} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] \vec{w}^2 \equiv \vec{w}^2 + \Phi \zeta \vec{w}^2 \quad (5.32)$$

Con esto se puede calcular (ver ecuación (5.4))

$$\begin{aligned} \langle \vec{U}^2 \rangle &= 4\langle \vec{d}^2 \rangle + \vec{w}^2 - 4\langle \vec{d} \rangle \cdot \vec{w} \\ &= 4\left[\vec{w}^2 + \Phi \zeta \vec{w}^2 \right] + \vec{w}^2 - 4\left[\vec{w} + \frac{\Phi}{2} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \vec{w} \right] \cdot \vec{w} \\ &= \vec{w}^2 + \Phi \left[-2 + 8 \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] \vec{w}^2 \quad (5.33) \end{aligned}$$

Para obtener el resultado (5.33) se utilizó el resultado del modelo dipolar para $\langle \vec{d} \rangle$. Con (5.33) y el resultado para $\langle \vec{U} \rangle$ del modelo dipolar, es posible calcular la desviación estándar.

$$\begin{aligned}
\sigma(\vec{U}) &= \sqrt{\langle \vec{U}^2 \rangle - \langle \vec{U} \rangle^2} \\
&= \sqrt{\vec{w}^2 + \Phi \left[-2 + 8 \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] \vec{w}^2 - \left(\vec{w} + \Phi \ln\left(\frac{5}{3}\right) \vec{w} \right)^2} \\
&= \sqrt{\vec{w}^2 + \Phi \left[-2 + 8 \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] \vec{w}^2 - \vec{w}^2 - 2\Phi \ln\left(\frac{5}{3}\right) \vec{w}^2 + O(\Phi^2)} \\
\therefore \sigma(\vec{U}) &= \|\vec{w}\| \sqrt{\left[6 \ln\left(\frac{5}{3}\right) - 2 \right] \Phi} \approx 1,032 \sqrt{\Phi} w
\end{aligned} \tag{5.34}$$

5.2. Desviación estándar por componentes

Se logró calcular la desviación estándar para la velocidad terminal, pero existe otra interesante pregunta: ¿cómo se comparan las fluctuaciones de la velocidad en sus dos componentes? Claramente hay una dirección privilegiada por la presencia de gravedad; ¿cómo afecta esto a las componentes paralela y perpendicular de la velocidad (en relación al vector \vec{g})?. Para ello se procederá a calcular la desviación estándar de cada componente de \vec{U} .

Primero que nada hay que definir un sistema de referencia: sin pérdida de generalidad, se elegirá el eje Y paralelo a \vec{g} (positivo en el sentido de \vec{g}) y el eje X perpendicular a \vec{g} .

Se tiene que

$$\begin{aligned}
\vec{U}_i &= 2\vec{d}_i - \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} \\
\vec{U}_i &= 2\vec{d}_i - \vec{w}
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned}
U_{ix} &= 2d_{ix} \\
U_{iy} &= 2d_{iy} - w
\end{aligned} \tag{5.36}$$

5.2.1. Cálculo de $\sigma(U_x)$

$$\begin{aligned}
U_{ix}^2 &= 4d_{ix}^2 \\
\langle U_x^2 \rangle &= 4\langle d_x^2 \rangle
\end{aligned} \tag{5.37}$$

Luego

$$\begin{aligned}
\sigma(U_x) &= \sqrt{\langle U_x^2 \rangle - \langle U_x \rangle^2} \\
&= \sqrt{4\langle d_x^2 \rangle - 4\langle d_x \rangle^2} \\
&= 2\sigma(d_x)
\end{aligned} \tag{5.38}$$

Hay que encontrar la desviación estándar de d_x . Para ello, se procede a despejar la componente X de la ecuación (5.5).

$$\begin{aligned}\vec{d}_i &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w} \quad / \cdot \hat{x} \\ d_{i,x} &= 0 - \sum_{k \neq i} \hat{x} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q \hat{x} (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w}\end{aligned}\quad (5.39)$$

Aprovechando que el eje X es perpendicular a \vec{w} e Y es paralelo a \vec{w} , se puede escribir $\hat{x} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} = \delta_{1\mu} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{\mu\nu} \delta_{\nu 2} w$, *i.e.*, \hat{x} recupera la primera componente mientras que \vec{w} la segunda.

De esta manera, usando $\hat{x} \Leftrightarrow \delta_{1\mu}$ y $\vec{w} \Leftrightarrow \delta_{\nu 2} w$ en (5.39),

$$\begin{aligned}d_{i,x} &= - \sum_{k \neq i} \delta_{1\mu} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{\mu\nu} \delta_{\nu 2} w + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q \delta_{1\mu} [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{\mu\nu} \delta_{\nu 2} w \\ &= - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{12} w + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{12} w\end{aligned}\quad (5.40)$$

Se procede a elevar al cuadrado esta ecuación.

$$\begin{aligned}d_{i,x}^2 &= \left\{ - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{12} w + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{12} w \right\} \left\{ - \sum_{l \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;l})_{12} w + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{l \neq i} (-1)^p [(\mathbb{K}_{il})^p]_{12} w \right\} \\ &= \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{12} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;l})_{12} w^2 - 2 \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{12} [(\mathbb{K}_{il})^p]_{12} w^2 \\ &+ \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i} \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^{p+q} [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{12} [(\mathbb{K}_{il})^p]_{12} w^2 \\ &\simeq \sum_{k \neq i} [(\mathbb{K}_{ik})_{12}]^2 w^2 - 2 \sum_{k \neq i} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p (\mathbb{K}_{ik})_{12} [(\mathbb{K}_{ik})^p]_{12} w^2 \\ &+ \sum_{k \neq i} \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^{p+q} [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{12} [(\mathbb{K}_{ik})^p]_{12} w^2 + O(\Phi^2)\end{aligned}\quad (5.41)$$

Para obtener el resultado (5.41) se separaron los términos con $l = k$ de aquellos con $l \neq k$ y se despreciaron estos últimos, pues como se podrá recordar, aportan términos de $O(\Phi^2)$. Además se aproximó $(\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})^c \approx (\mathbb{K}_{ik})^c$ con $c \geq 2$.

Se debe proceder a calcular el promedio; de los cálculos realizados anteriormente se puede deducir que al momento de promediar la ecuación (5.41) simplemente es necesario reemplazar las sumas en k por integrales con la función distribución de pares, *i.e.*,

$$\sum_{k \neq i} (\text{algo}) \quad \longrightarrow \quad n \int (\text{algo}) g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \langle d_x^2 \rangle &= n \int [(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12}]^2 g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v w^2 - 2n \int \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p (\mathbb{K}(\vec{v}))_{12} [(\mathbb{K}(\vec{v}))^p]_{12} g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v w^2 \\ &+ n \int \left[\sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q [(\mathbb{K}(\vec{v}))^q]_{12} \right] \left[\sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p [(\mathbb{K}(\vec{v}))^p]_{12} \right] g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v w^2 \end{aligned} \quad (5.42)$$

Se ha de recordar que

$$\begin{aligned} \sum_{p=2}^{\infty} (-1)^p (\mathbb{K}(\vec{v}))^p &= \sum_{p=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{v}))^{2p} - \sum_{p=1}^{\infty} (\mathbb{K}(\vec{v}))^{2p+1} = \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{a}{v}\right)^{4p} \mathbb{I} - \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{a}{v}\right)^{4p} \mathbb{K}(\vec{v}) \\ &= \left(\frac{1}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} \right) \mathbb{I} - \left(\frac{1}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} \right) \mathbb{K}(\vec{v}) \end{aligned} \quad (5.43)$$

Usando este resultado se obtiene

$$\begin{aligned} \langle d_x^2 \rangle &= \underbrace{n \int [(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12}]^2 g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v w^2}_{I_A} - \underbrace{2n \int (\mathbb{K}(\vec{v}))_{12} \left[\frac{-(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12}}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} \right] g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v w^2}_{I_B} \\ &+ \underbrace{n \int \frac{[(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12}]^2}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v w^2}_{I_C} \end{aligned} \quad (5.44)$$

Se necesita $(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12}$. Como

$$\mathbb{K}(\vec{v}) = \frac{a^2}{v^2} [\mathbb{I} - 2\hat{v}\hat{v}] = \frac{a^2}{v^4} [\mathbb{I}v^2 - 2\vec{v}\vec{v}]$$

se tiene que

$$(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12} = \frac{a^2}{v^4} [-2v_x v_y] \quad (5.45)$$

Resulta más apropiado escribir el resultado (5.45) en coordenadas polares pues facilitará el cálculo. Llamando γ al ángulo que forma el vector \vec{v} con el eje X ,

$$(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12} = \frac{a^2}{v^4} [-2v \cos(\gamma) v \sin(\gamma)] = -2 \frac{a^2}{v^2} \cos(\gamma) \sin(\gamma) \quad (5.46)$$

Se procede a calcular cada una de las integrales usando el resultado (5.46) y la misma aproximación para la función distribución de pares de considerar sólo volumen excluido.

$I_A]$

$$\begin{aligned} n \int [(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12}]^2 g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v w^2 &= n w^2 \int_{2a}^{\infty} 4 \frac{a^4}{v^4} v dv \int_0^{2\pi} \cos^2(\gamma) \sin^2(\gamma) d\gamma \\ &= \Phi \frac{w^2}{8} \end{aligned} \quad (5.47)$$

$I_B]$

$$\begin{aligned}
+ 2n \int \frac{[(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12}]^2}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} g^{(2)}(\vec{v}) d^2v w^2 &= 2nw^2 \int_{2a}^{\infty} 4 \frac{a^4}{v^4} \frac{1}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} v dv \int_0^{2\pi} \cos^2(\gamma) \sin^2(\gamma) d\gamma \\
&= \Phi \left[\frac{1}{2} \ln\left(\frac{5}{3}\right) - \frac{1}{4} \right] w^2
\end{aligned} \tag{5.48}$$

$I_C]$

$$\begin{aligned}
n \int \frac{[(\mathbb{K}(\vec{v}))_{12}]^2}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} g^{(2)}(\vec{v}) d^2v w^2 &= nw^2 \int_{2a}^{\infty} 4 \frac{a^4}{v^4} \frac{1}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} v dv \int_0^{2\pi} \cos^2(\gamma) \sin^2(\gamma) d\gamma \\
&= \Phi \left[\frac{23}{120} - \frac{3}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] w^2
\end{aligned} \tag{5.49}$$

Finalmente, al reunir los resultados (5.47), (5.48) y (5.49) se obtiene

$$\langle d_x^2 \rangle = \Phi \left[\frac{1}{15} + \frac{1}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] w^2 \tag{5.50}$$

Todavía es necesario calcular $\langle d_x \rangle$; el procedimiento es el mismo y resulta bastante sencillo. Se procede a calcular el promedio de la ecuación (5.40) calculando cada integral resultante para así obtener

$$\langle d_x \rangle = 0$$

Lo cual es razonable dado que no hay una razón *a priori* que privilegie la izquierda o la derecha. A partir de la expresión $\langle \vec{d} \rangle = [1 + (1/2)\ln(5/3)\Phi] \vec{w}$, se puede observar que se cumple que $\langle d_x \rangle = \langle \vec{d} \rangle_x$. Esto es simplemente porque promediar implica esencialmente integrar, y el producto punto con \hat{x} puede salir y entrar de las integrales sin problemas.

Con estos resultados ya se puede calcular $\sigma(d_x)$.

$$\begin{aligned}
\sigma(d_x) &= \sqrt{\langle d_x^2 \rangle - \langle d_x \rangle^2} = \sqrt{\Phi \left[\frac{1}{15} + \frac{1}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right]} \|\vec{w}\| \\
\therefore \sigma(U_x) &= 2 \sqrt{\Phi \left[\frac{1}{15} + \frac{1}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right]} \|\vec{w}\| \\
&\simeq 0,723 \sqrt{\Phi} w
\end{aligned} \tag{5.51}$$

5.2.2. Cálculo de $\sigma(U_y)$

Dado que $\sigma^2(\vec{U}) = \sigma^2(U_x) + \sigma^2(U_y)$, se cumple que

$$\sigma(U_y) = \sqrt{\sigma^2(\vec{U}) - \sigma^2(U_x)} \tag{5.52}$$

Reemplazando los resultados (5.34) y (5.51) en (5.52), se obtiene

$$\begin{aligned}
\sigma(U_y) &= \sqrt{w^2 \left[6 \ln\left(\frac{5}{3}\right) - 2 \right] \Phi - 4w^2 \left[\frac{1}{15} + \frac{1}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] \Phi} \\
&= w \sqrt{\left[-\frac{34}{15} + \frac{11}{2} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] \Phi} = 0,73680001631805 \sqrt{\Phi} w \\
&\approx 0,737 \sqrt{\Phi} w
\end{aligned} \tag{5.53}$$

De todas maneras, en el apéndice B se calcula $\sigma(U_y)$ mediante el método antes utilizado para calcular $\sigma(U_x)$ (resultado (5.51)). Como se muestra en dicho apéndice, el resultado (5.53) es muy similar al obtenido con el método anterior.

5.3. Modelo cuadrupolar

Con el fin de comparar los resultados obtenidos usando el modelo dipolar, se procederá a mostrar los resultados usando el modelo cuadrupolar para $\sigma(U_x)$ y $\sigma(U_y)$. Dado que el objetivo principal es ver la diferencia en las predicciones de ambos modelos, no se calculará $\sigma(\vec{U})$.

A sexto orden, el modelo cuadrupolar entrega como resultado

$$\begin{aligned}
\vec{d}_i &= \vec{w} + \sum_{k \neq i} \left[\left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^4 - 2 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^6 + \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^8 - 6 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{10} + 17 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{12} - 28 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{14} + 48 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{16} \right. \\
&\quad \left. - 134 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{18} + 216 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{20} - 162 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{22} \right] \vec{w} \\
&+ \sum_{k \neq i} \left[- \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^4 + 4 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^6 - 7 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^8 + 8 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{10} - 30 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{12} + 60 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{14} - 54 \left(\frac{a}{R_{ik}} \right)^{16} \right] \mathbb{K}_{ik} \vec{w} \\
&- \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w} \\
\vec{d}_i &\equiv \vec{w} + \sum_{k \neq i} A_{ik} \vec{w} + \sum_{k \neq i} B_{ik} \mathbb{K}_{ik} \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i,k} \vec{w}
\end{aligned} \tag{5.54}$$

En la ecuación (5.54) se han definido las funciones A_{ik} y B_{ik} para facilitar la notación. Esta expresión es la que se usará para los cálculos siguientes.

5.3.1. Cálculo de $\sigma(U_x)$

De la misma manera en que se calculó $d_{i,x}$ anteriormente, se puede obtener para el modelo cuadrupolar

$$d_{i,x} = - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i,k})_{12} w + \sum_{k \neq i} B_{ik} (\mathbb{K}_{ik})_{12} w \tag{5.55}$$

Se eleva al cuadrado, despreciando las dobles sumas y aproximando el tensor $\tilde{\mathbb{K}}$ por \mathbb{K} cuando corresponde (*i.e.*, usando los mismos argumentos que en la sección 5.2 para el modelo dipolar). Luego se calcula el promedio, obteniendo

$$\begin{aligned}
\langle d_x^2 \rangle &= n \int (1 - 2B(\vec{X}) + B(\vec{X})^2) [(\mathbb{K}(\vec{X}))_{12}]^2 g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X w^2 \\
&= n \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} 4 \left(\frac{a}{X} \right)^4 \cos^2(\phi) \sin^2(\phi) (1 - 2B(\vec{X}) + B(\vec{X})^2) X dX d\phi w^2 \\
&\simeq 0,128 \Phi w^2
\end{aligned} \tag{5.56}$$

Recordando que $\langle d_x \rangle = 0$, se concluye que

$$\sigma(d_x) = \sqrt{\langle d_x^2 \rangle - \langle d_x \rangle^2} = \sqrt{\langle d_x^2 \rangle} \simeq 0,357 \sqrt{\Phi} \|\vec{w}\|$$

Por lo tanto,

$$\sigma(U_x) = 2\sigma(d_x) \simeq 0,714 \sqrt{\Phi} w \tag{5.57}$$

5.3.2. Cálculo de $\sigma(U_y)$

En este caso se tiene que

$$d_{iy} = \left(1 + \sum_{k \neq i} A_{ik} \right) w - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{ik})_{22} w + \sum_{k \neq i} B_{ik} (\mathbb{K}_{ik})_{22} w$$

Usando este resultado, se obtiene que

$$\begin{aligned}
\langle d_y^2 \rangle &= w^2 + w^2 n \int (2A(\vec{X}) + A(\vec{X})^2) g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \\
&+ w^2 n \int (1 - 2B(\vec{X}) + B(\vec{X})^2) [(\mathbb{K}(\vec{X}))_{22}]^2 g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \\
&+ 2w^2 n \int (B(\vec{X}) + A(\vec{X})B(\vec{X}) - A(\vec{X})) (\mathbb{K}(\vec{X}))_{22} g^{(2)}(\vec{X}) d^2 X \\
&- 2w^2 n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{X \geq \epsilon} (\mathbb{K}(\vec{X}))_{22} h^{(2)}(\vec{X}) d^2 X
\end{aligned} \tag{5.58}$$

La última integral se anula (ver el análisis de (B.7)). Luego de calcular las integrales, el resultado es

$$\langle d_y^2 \rangle \simeq w^2 + 0,508 \Phi w^2 \tag{5.59}$$

Para $\langle d_y \rangle$ el modelo cuadrupolar a sexto orden entrega

$$\langle d_y \rangle \simeq w + 0,189 \Phi w$$

Con este par de resultados,

$$\begin{aligned}
\sigma(d_y) &= \sqrt{(w^2 + 0,508 \Phi w^2) - (w^2 + 0,379 \Phi w^2 + O(\Phi^2))} \\
&\simeq 0,360 \sqrt{\Phi} \|\vec{w}\| \\
\therefore \sigma(U_y) &\simeq 0,720 \sqrt{\Phi} \vec{w}
\end{aligned} \tag{5.60}$$

Habiendo obtenido los resultados con el modelo cuadrupolar, interesantes conclusiones se pueden obtener. Como se puede observar, los resultados (5.51) y (5.57) para $\sigma(U_x)$, (5.53) y (5.60) para $\sigma(U_y)$ entregan resultados bastante similares.

Interesante es comparar estos resultados con el caso en tres dimensiones; en sistemas tridimensionales las fluctuaciones son del mismo orden que la velocidad terminal, *i.e.*, $\sigma(U_y)^{3D} \simeq O(\langle \vec{U} \rangle^{3D})$. Por otro lado, el resultado obtenido en esta tesis predice fluctuaciones que son bastante más pequeñas que la velocidad terminal \vec{w} ; esto se puede ver fácilmente al reemplazar valores razonables para soluciones diluidas. Considerando $\Phi = 0,001$ [29], entonces

$$\sigma(U_y) = 0,720 \sqrt{\Phi} \|\vec{w}\| \simeq 2,2 \times 10^{-2} w$$

en tanto que el resultado del modelo cuadrupolar para la velocidad terminal es

$$\langle \vec{U} \rangle = \vec{w} + 0,378\Phi\vec{w} \simeq \vec{w} + 3,78 \times 10^{-4} \vec{w} \sim O(w)$$

Es decir, las fluctuaciones de velocidad para este valor de Φ son dos órdenes de magnitud menores que la velocidad terminal. Además, en el caso tridimensional las fluctuaciones son anisótropas: las fluctuaciones verticales son el doble en tamaño que las horizontales. En este sistema bidimensional, en cambio, son del mismo tamaño, *i.e.*, a pesar de que la gravedad implica una dirección privilegiada, no hay anisotropía en las fluctuaciones. Sin embargo, también hay que tomar en cuenta que se utilizó una función distribución de pares isotropa. Sólo mediante experimentos en este tipo de sistemas se podría verificar esta predicción del modelo.

El modelo cuadrupolar se diferencia del dipolar en tensores que decaen rápidamente con la distancia, por lo que ambos modelos deberían ser parecidos a largas distancias. Sin embargo, esto no ocurre para distancias cercanas, es decir, para partículas próximas unas a otras. Esto se debe a que los supuestos usados en la deducción del modelo cuadrupolar (deducción que usa el modelo de Hele-Shaw) empiezan a ser menos válidos cuando las partículas se aproximan; en particular, la geometría de las partículas empieza a tener un rol más importante. Finalmente, para partículas muy cercanas entre sí, es necesario emplear un modelo distinto para la interacción entre partículas (conocido generalmente como *modelo de lubricación*).

Ya que en los desarrollos involucrados en el cálculo de la velocidad terminal y la desviación estándar aparecen integrales que van desde el diámetro $2a$ de una partícula, no se puede esperar un resultado muy preciso, ya que el modelo no es muy aplicable para separaciones del orden $O(a)$. Es por esto que resulta interesante haber obtenido que ambos modelos diesen valores similares para la desviación estándar pues, a pesar de que el modelo cuadrupolar es más preciso que el modelo dipolar, esto indica que la información más importante es rescatada por el modelo dipolar. El hecho de que las predicciones para la velocidad terminal difieran indica que el modelo dipolar no es suficiente si se desean resultados más precisos que los de primer orden.

Finalmente, que las fluctuaciones de la velocidad escalen como $\sqrt{\Phi}$ permite relacionar las fluctuaciones de velocidad con las fluctuaciones en el número de partículas. Una explicación cualitativa se da a continuación.

El número promedio de partículas en una sub-área Ω del sistema está relacionado con Φ de la siguiente manera

$$\langle N_\Omega \rangle \sim \Phi \Omega \quad (5.61)$$

Para suspensiones aleatorias uniformes como las supuestas en los desarrollos de esta tesis, se puede suponer que no habrán correlaciones de largo alcance entre las partículas. En este caso, las fluctuaciones en el número de partículas son del estilo

$$\sigma(N) = \sqrt{N}$$

Usando la relación (5.61), se obtiene

$$\sigma(N) = \sqrt{N} \sim \sqrt{\Phi} \sim \sigma(\vec{U})$$

De esta manera se han relacionado las fluctuaciones de la velocidad con aquellas en el número de partículas. Esto es físicamente muy razonable, pues una diferencia en el número promedio de partículas entre dos zonas continuas implica un flujo convectivo de partículas que tiende a nivelar esa diferencia. Esta convección se traduce en un cambio en la velocidad de las partículas pertenecientes a estas zonas, provocando así fluctuaciones en la velocidad promedio.

5.4. Resumen de resultados

En conclusión, los resultados obtenidos son

Modelo Dipolar

$$\begin{aligned} \langle \vec{U} \rangle &= (1 + \ln(5/3)\Phi)\vec{w} \simeq (1 + 0,511\Phi)\vec{w} & (5.62) \\ \sigma(\vec{U}) &= \|\vec{w}\| \sqrt{\left[6\ln\left(\frac{5}{3}\right) - 2\right]\Phi} \approx 1,032 \sqrt{\Phi} w \\ \sigma(U_x) &= 2\sqrt{\Phi \left[\frac{1}{15} + \frac{1}{8}\ln\left(\frac{5}{3}\right)\right]} \|\vec{w}\| \approx 0,723 \sqrt{\Phi} w \\ \sigma(U_y) &= 2\sqrt{\Phi \left[\frac{1}{5} - \frac{1}{8}\ln\left(\frac{5}{3}\right)\right]} \|\vec{w}\| \approx 0,738 \sqrt{\Phi} w \end{aligned}$$

Modelo Cuadrupolar

$$\begin{aligned} \langle \vec{U} \rangle &= (1 + 0,378\Phi)\vec{w} & (5.63) \\ \sigma(U_x) &= 0,714 \sqrt{\Phi} w \\ \sigma(U_y) &= 0,720 \sqrt{\Phi} w \end{aligned}$$

5.5. Una interesante observación

Hay un importante punto que se ha de mencionar. El modelo cuadrupolar para describir una suspensión,

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbf{K}}_{i;k} \vec{d}_k + \mathbf{L}_{ik} \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i + \tilde{\mathbf{A}}_i \vec{d}_i \quad (5.64)$$

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbf{M}_{ik} \vec{d}_k + \mathbf{N}_{ik} \mathbf{Q}_k) \quad (5.65)$$

posee la información de las interacciones entre las N partículas y el efecto del fluido subyacente en el sistema, y a partir de él se pueden calcular importantes propiedades de la suspensión como son la velocidad de sedimentación o la desviación estándar, como se ha hecho en esta tesis. Inicialmente se empezó en un marco teórico que consideraba un medio infinito; se concluyó que esto conducía a integrales condicionalmente convergentes, por lo que explícitamente se introdujo el efecto de paredes en el sistema, información que quedó incorporada implícitamente en el tensor modificado $\tilde{\mathbb{K}}$ y el tensor $\tilde{\mathbb{A}}$.

Sin embargo, como se podrá apreciar al observar las expresiones usadas para los cálculos de la velocidad terminal y desviaciones estándar (ver expresiones (4.56), (5.42) y (B.5)), *en ellas no aparece el tensor $\tilde{\mathbb{K}}$, sino que aparece \mathbb{K}* . Es decir, la manera en que se utilizó la condición de suspensión diluida y alejada de las paredes en la metodología del cálculo, **permitió llegar a expresiones que son independientes de la geometría y tamaño del sistema**. Podría consistir en una celda de Hele-Shaw circular, cuadrada o rectangular; finalmente, dicha información no aporta al resultado final de la velocidad terminal o la desviación estándar.

Se debe explicar que la independencia del tamaño del sistema es en el sentido de que el resultado no depende de él, pues se recuerda que un supuesto usado fue que existe una región en que las partículas están alejadas de las paredes. El análisis se limitó a esta región, despreciando la región cercana a las paredes bajo el supuesto de que esta última región es mucho más pequeña que aquella lejana a las paredes. Para que se pueda usar esta aproximación se necesita un sistema de dimensiones mucho mayores que el diámetro de las partículas.

El paso crucial para obtener los resultados de los capítulos 4 y 5 se reproduce a continuación para clarificar este hecho. Las integrales que involucraban al tensor $\tilde{\mathbb{K}}$ y, por ende, dependen de la geometría particular del sistema, eran del estilo

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \quad (5.66)$$

donde el límite se usa para evitar la divergencia en $R = 0$. A continuación, siguiendo la metodología de Batchelor [4] se procede a restar a la expresión anterior un “cero”, es decir, agregar un término que en realidad es nulo. Recordando la propiedad de $\tilde{\mathbb{K}}$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{X} - \vec{Y}\| \geq \epsilon} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{X}, \vec{Y}) d^2 Y = 0$$

se procede entonces a restar este término a la expresión en (5.66).

$$\begin{aligned} & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) (g^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) - 1) d^2 R_1 d^2 R_2 \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\|\vec{R}_1 - \vec{R}_2\| \geq \epsilon} \tilde{\mathbb{K}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) h^{(2)}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) d^2 R_1 d^2 R_2 \end{aligned} \quad (5.67)$$

En la expresión (5.67) aparece la función correlación de pares $h^{(2)}$, la cual decae rápidamente con la distancia. Este decaimiento tiene el efecto de sofocar las interacciones entre partículas lejanas (en particular, las interacciones entre las partículas reales y las imágenes) respecto a las cercanas; esto permite despreciar las interacciones con las imágenes, lo cual se traduce en aproximar $\tilde{\mathbb{K}}$ por \mathbb{K} , con lo cual se obtiene una expresión independiente de la geometría y del tamaño del sistema.

Es importante notar que la expresión (5.66) ya era convergente de por sí. Este método fue aplicado con el objetivo de obtener una expresión independiente de la geometría, no así en el caso de Batchelor [4]. En dicho caso se realizó un manejo algebraico para obtener integrales convergentes, integrales que debían ser convergentes pues aparecen en el cálculo de importantes propiedades de una suspensión (*e.g.*, la velocidad terminal).

Capítulo 6

Cálculo de la función correlación de pares

Resumen

En los capítulos anteriores ha quedado bastante claro la importancia de la función distribución de partículas, dado que está involucrada en los cálculos de las propiedades del sistema. En el caso estudiado de suspensiones diluidas, los cálculos desarrollados para obtener la velocidad terminal y la desviación estándar condujeron a expresiones dependientes de la función distribución de pares $g^{(2)}$; por lo tanto, es fundamental poseer un buen modelo de esta función si se desea obtener resultados más fiables y precisos. Con esto en mente, en este capítulo se deduce un modelo para esta función en el estado estacionario del sistema. Se parte desde la base de la Mecánica Estadística de No Equilibrio utilizando la *Ecuación de Liouville*. De esta manera se obtiene una ecuación para la función distribución, que corresponde a la jerarquía YBG (Yvon-Born-Green) de este sistema. Gracias a ciertas aproximaciones, se obtiene un resultado analítico para la función correlación de pares y, a partir de éste, se calcula un nuevo valor de la velocidad terminal.

6.1. Ecuación de evolución del sistema

Sea la función *distribución de probabilidad* $F(\Gamma, t)$ para la suspensión estudiada, donde Γ corresponde a un punto del espacio de fase ($\Gamma = \{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{U}_1, \vec{U}_2, \dots, \vec{U}_N\}$). La ecuación que determina la evolución del sistema¹ es la *Ecuación de Liouville* [17].

$$\frac{\partial F(\Gamma, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot [\vec{G}_i(\Gamma) F(\Gamma, t)] + \frac{\partial}{\partial \vec{U}_i} \cdot (\vec{G}_{i+N}(\Gamma) F(\Gamma, t)) = 0 \quad i \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (6.1)$$

O escrito en forma más compacta,

$$\frac{\partial F(\Gamma, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{\Gamma}} \cdot (\vec{G}(\Gamma) F(\Gamma, t)) = 0 \quad (6.2)$$

donde el vector $\vec{G}_i(\Gamma)$ corresponde a las ecuaciones de movimiento, cuya expresión se obtendrá a

¹Dado que aparece dos veces el índice i , implícitamente esto indica una suma con $i = 1, \dots, N$

continuación. Como se podrá recordar de los resultados obtenidos en el capítulo 2, sección 2.3.1, la fuerza sobre una partícula de la suspensión bajo el efecto de la gravedad es

$$\vec{F}_i = m_i \frac{d\vec{U}_i}{dt} = -\frac{m_f}{\tau_f} \vec{d}_i - \frac{m_f}{\tau_f} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N (\mathbb{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbb{Q}_k) + m_i \vec{g} \quad (6.3)$$

donde \vec{U}_i es la velocidad de la partícula i , m_i su masa, \vec{g} es la aceleración de gravedad y, de acuerdo al modelo cuadrupolar,

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{d}_k + \mathbb{L}_{ik} \mathbb{Q}_k) + \vec{U}_i + \tilde{\mathbb{A}}_i \vec{d}_i$$

El objetivo de este capítulo es obtener una corrección a la expresión utilizada anteriormente para la función distribución de pares (ver (4.58)). Por esta razón el análisis se restringirá a considerar simplemente el límite de suspensión muy diluida en un sistema infinito, el cual consiste en despreciar las interacciones hidrodinámicas entre las partículas además de no considerar los efectos de las paredes. Esto se traduce en imponer $\tilde{\mathbb{K}} = \mathbb{Q} = \tilde{\mathbb{A}}_i = 0$, por lo que

$$\vec{d}_i \approx \vec{U}_i$$

Reemplazando esta expresión para \vec{d}_i en (6.3), se obtiene

$$\frac{d\vec{U}_i}{dt} = \vec{g} - \frac{m_f}{m_i \tau_f} \vec{U}_i - \frac{m_f}{m_i \tau_f} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{U}_k \quad (6.4)$$

Se definen \vec{r}_i como la coordenada de la partícula i y $\gamma \equiv \frac{m_f}{\tau_f}$. Se concluye entonces que las ecuaciones de movimiento que determinan la dinámica del sistema en el régimen considerado son

$$\vec{G}(\Gamma) = \begin{cases} \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{U}_i & \text{Para las primeras } N \text{ componentes } \quad (\vec{G}_i, i \in \{1, 2, \dots, N\}) \\ \frac{d\vec{U}_i}{dt} = \vec{g} - \frac{\gamma}{m_i} \vec{U}_i - \frac{\gamma}{m_i} \sum_{k \neq i}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{U}_k & \text{Para las segundas } N \text{ componentes } \quad (\vec{G}_{i+N}, i \in \{1, 2, \dots, N\}) \end{cases} \quad (6.5)$$

Notar que γ/m_i es equivalente a un coeficiente de roce viscoso. Se debe incorporar en estas ecuaciones el hecho de que se estudia el régimen no inercial (número de Reynolds pequeño), en que las fuerzas viscosas son lo suficientemente grandes como para poder despreciar los efectos inerciales. Esto se traduce en imponer $\dot{\vec{U}}_i = 0$ en (6.5). Se puede despejar \vec{U}_i de la segunda ecuación y obtener

$$\vec{G}(\Gamma) = \begin{cases} \vec{U}_i = \frac{m_i}{\gamma} \vec{g} - \sum_{k \neq i}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{U}_k & (\vec{G}_i, i \in \{1, 2, \dots, N\}) \\ \frac{d\vec{U}_i}{dt} = 0 & (\vec{G}_{i+N}, i \in \{1, 2, \dots, N\}) \end{cases} \quad (6.6)$$

La ecuación (6.6) permite deducir que la velocidad ya no es una variable independiente, sino que pasa a ser una función de las N distintas posiciones de las partículas de la suspensión, *i.e.*, $\vec{U} = \vec{U}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. Luego, razonablemente $F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{U}_1, \dots, \vec{U}_N)$ pasa a ser una función sólo de las posiciones de las N partículas, $F \rightarrow F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. Se analizará el estado estacionario, lo cual implica imponer $\partial F / \partial t = 0$ en (6.1). Por lo tanto, la ecuación a resolver es

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot (\vec{U}_i F) = 0 \quad (6.7)$$

Claramente se necesita conocer la dependencia de \vec{U}_i en las coordenadas si se desea buscar una solución a la ecuación (6.7). La ecuación (6.6) permitirá lograr este objetivo. Definiendo $\vec{W}_i \equiv m_i \vec{g} / \gamma$, esta ecuación dice que

$$\vec{U}_i = \vec{W}_i - \sum_{k \neq i}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{U}_k$$

Esta ecuación se puede resolver de la misma manera en que se procedió para determinar el vector dipolar en el capítulo 4.

$O(0)$]

$$\vec{U}_i^{(0)} = \vec{W}_i$$

$O(1)$]

$$\vec{U}_i^{(1)} = \vec{W}_i - \sum_{k \neq i}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{W}_k$$

$O(2)$]

$$\begin{aligned} \vec{U}_i^{(2)} &= \vec{W}_i - \sum_{k \neq i}^N \mathbb{K}_{ik} \left\{ \vec{W}_i - \sum_{l \neq k}^N \mathbb{K}_{kl} \vec{W}_l \right\} \\ &\approx \vec{W}_i - \sum_{k \neq i}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{W}_i + \sum_{k \neq i}^N (\mathbb{K}_{ik})^2 \vec{W}_i + (\text{términos más pequeños}) \end{aligned}$$

En la última expresión se despreciaron los términos con dobles sumas (*i.e.*, con $k \neq i, l \neq i, k$) de la misma manera en que se hizo en el capítulo 4. En dicho cálculo se argumentó que al momento de calcular el promedio estadístico, estos términos aportan valores del orden $O(\Phi^2)$. En este caso, a pesar de que no se vaya a tomar el promedio estadístico de la ecuación, es razonable considerar que para una suspensión diluida los encuentros entre tres partículas (*i.e.*, configuraciones en que tres partículas están relativamente cercanas, por lo que los tensores \mathbb{K}_{ik} y \mathbb{K}_{kl} no son despreciables) son mucho más infrecuentes que las interacciones de a pares; por esta razón estos términos son despreciados.

Habiendo explicado esto, se puede continuar iterando.

$O(3)$]

$$\vec{U}_i^{(3)} = \vec{W}_i - \sum_{k \neq i}^N \mathbb{K}_{ik} \vec{W}_i + \sum_{k \neq i}^N (\mathbb{K}_{ik})^2 \vec{W}_i - \sum_{k \neq i}^N (\mathbb{K}_{ik})^3 \vec{W}_i$$

$O(\infty)$]

$$\vec{U}_i = \vec{W}_i + \sum_{k \neq i}^N \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n (\mathbb{K}_{ik})^n \vec{W}_i$$

Usando que

$$\begin{aligned}
\sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p (\mathbb{K}_{ik})^p &= \sum_{p=1}^{\infty} (\mathbb{K}_{ik})^{2p} - \sum_{p=0}^{\infty} (\mathbb{K}_{ik})^{2p+1} = \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^{4p} \mathbb{I} - \sum_{p=0}^{\infty} \left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^{4p} \mathbb{K}_{ik} \\
&= \left(\frac{\left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^4}{1 - \left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^4} \right) \mathbb{I} - \left(\frac{1}{1 - \left(\frac{a}{R_{ik}}\right)^4} \right) \mathbb{K}_{ik} \\
&\equiv \mathbb{T}_{ik}
\end{aligned} \tag{6.8}$$

En el resultado (6.8) se ha definido el tensor \mathbb{T} para simplificar la notación. En conclusión,

$$\vec{U}_i = \vec{W}_i + \sum_{k \neq i}^N \mathbb{T}_{ik} \vec{W}_k \tag{6.9}$$

Reemplazando la expresión (6.9) en (6.7), se obtiene

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left\{ \left(\vec{W}_i + \sum_{k \neq i}^N \mathbb{T}_{ik} \vec{W}_k \right) F \right\} = 0 \tag{6.10}$$

donde se ha escrito en forma explícita la suma en i . A continuación, se define la función *distribución de probabilidad reducida de l partículas* f_l como

$$f_l(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l) = \frac{N!}{(N-l)!} \int F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N \tag{6.11}$$

Para obtener una ecuación para la evolución de f_l se procede a calcular

$$\frac{N!}{(N-l)!} \int (\text{ecuación (6.10)}) d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N$$

Para escribir esta expresión se separan los términos de la suma con $i \leq l$ de aquellos con $i > l$ (también en la suma en k). De esta manera se obtiene

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^l \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left\{ \vec{W}_i f_l + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^l \mathbb{T}_{ik} \vec{W}_k f_l \right\} + \sum_{i=1}^l \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left\{ \sum_{\substack{k=l+1 \\ k \neq i}}^N \frac{N!}{(N-l)!} \int \mathbb{T}_{ik} \vec{W}_k F d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N \right\} \\
+ \sum_{i=l+1}^N \frac{N!}{(N-l)!} \int \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left\{ \left(\vec{W}_i + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \mathbb{T}_{ik} \vec{W}_k \right) F \right\} d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N = 0
\end{aligned} \tag{6.12}$$

Los términos en la suma con $i = l+1 \dots N$ se anulan, pues gracias al teorema de la divergencia la integral de volumen puede pasarse a una integral de superficie (en el espacio de fase). Eligiendo una superficie infinitamente lejana (*i.e.*, las coordenadas infinitamente lejanas), se concluye que la integral es cero pues la función distribución de probabilidad decae a cero a tales distancias (no es probable encontrar partículas infinitamente lejanas, pues aunque el modelo contempla un

sistema “infinito”, bajo consideraciones prácticas esto corresponde a un sistema muy grande de dimensiones mucho mayores a cualquiera de las longitudes relevantes del problema; en cierto punto del espacio existen las paredes del recipiente).

Factorizando por el vector \vec{W}_i , se tiene que

$$\sum_{i=1}^l \left[\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left\{ f_i + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^l \mathbb{T}_{ik} f_i \right\} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left\{ \sum_{\substack{k=l+1 \\ k \neq i}}^N \frac{N!}{(N-l)!} \int \mathbb{T}_{ik} F d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N \right\} \right] \cdot \vec{W}_i = 0 \quad (6.13)$$

Como se puede apreciar, (6.13) consta de una suma de l términos, cada uno multiplicado por su respectivo \vec{W}_i . Sin embargo, cada W_i es independiente, lo que permite obtener

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left\{ f_i + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^l \mathbb{T}_{ik} f_i \right\} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left\{ \sum_{\substack{k=l+1 \\ k \neq i}}^N \frac{N!}{(N-l)!} \int \mathbb{T}_{ik} F d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N \right\} = 0$$

para cualquier $i \in \{1, \dots, N\}$. En particular, se puede elegir $i = 1$.

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} \cdot \left\{ f_1 + \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq 1}}^l \mathbb{T}_{1k} f_1 \right\} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} \cdot \left\{ \sum_{\substack{k=l+1 \\ k \neq 1}}^N \frac{N!}{(N-l)!} \int \mathbb{T}_{1k} F d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N \right\} = 0 \quad (6.14)$$

El segundo término de la ecuación (6.14) todavía depende de la función F y se desea llegar a una ecuación para f_i ; sin embargo, con un poco más de álgebra se puede lograr este objetivo, considerando además un tipo particular de suspensiones. Se limitará el estudio al caso de partículas idénticas e indistinguibles², por lo que sin pérdida de generalidad se puede proceder a elegir una partícula en particular, *i.e.*, se elige $k = l + 1$, y se multiplica por el número de términos en la suma en k en el segundo término de (6.14).

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} \cdot \left\{ f_1 + \sum_{k=2}^l \mathbb{T}_{1k} f_1 \right\} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} \cdot \left\{ (N-l) \frac{N!}{(N-l)!} \int \mathbb{T}_{1(l+1)} F d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N \right\} = 0$$

Reacomodando ciertos términos,

$$\begin{aligned} (N-l) \frac{N!}{(N-l)!} \int \mathbb{T}_{1(l+1)} F d^2 r_{l+1} \dots d^2 r_N &= \int \mathbb{T}_{1(l+1)} \left(\frac{N!}{(N-(l+1))!} \int F d^2 r_{l+2} \dots d^2 r_N \right) d^2 r_{l+1} \\ &= \int \mathbb{T}_{1(l+1)} f_{l+1} d^2 r_{l+1} \end{aligned}$$

Se obtiene finalmente

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} \cdot \left\{ f_1 + \sum_{k=2}^l \mathbb{T}_{1k} f_1 \right\} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} \cdot \int \mathbb{T}_{1(l+1)} f_{l+1} d^2 r_{l+1} = 0 \quad (6.15)$$

²El argumento de considerar distintos vectores \vec{W}_i depende de considerar una distribución de probabilidad reducida f_i no simetrizada en las partículas. Luego de deducir la ecuación (6.14) se puede considerar el caso particular en que todas las partículas son idénticas (caso en que f_i es una función simétrica).

Se ha obtenido, por lo tanto, la ecuación que determina la evolución de la distribución de probabilidad reducida; sin embargo, resulta más apropiado trabajar con variables adimensionales, por lo que se procede a definir

$$\vec{r} = a\vec{x} \quad ; \quad t = \frac{m}{\gamma}s \quad ; \quad \vec{W} = \frac{a\gamma}{m}\vec{v} \quad ; \quad f_l = \left(\frac{1}{a^2}\right)^l \tilde{f}_l \quad ; \quad \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{ik}) = \mathbb{T}(a\vec{x}_{ik})$$

Y se cumple que

$$\int \tilde{f}_l d^2x_1 \dots d^2x_l = \int f_l d^2r_1 \dots d^2r_l$$

La ecuación (6.15) queda entonces de la siguiente forma

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} \cdot \left\{ \tilde{f}_l + \sum_{k=2}^l \widehat{\mathbb{T}}_{1k} \tilde{f}_l \right\} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}_{1(l+1)} \tilde{f}_{l+1} d^2x_{l+1} = 0$$

Utilizando notación vectorial, esta ecuación corresponde a

$$\vec{\nabla}_{x_1} \tilde{f}_l + \sum_{k=2}^l \vec{\nabla}_{x_1} \cdot (\widehat{\mathbb{T}}_{1k} \tilde{f}_l) = -\vec{\nabla}_{x_1} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}_{1(l+1)} \tilde{f}_{l+1} d^2x_{l+1} \quad (6.16)$$

Se cambió a la notación de gradientes y divergencias para mostrar claramente el carácter *vectorial* del sistema de l ecuaciones (6.16); este sistema puede considerarse como la **jerarquía YBG** correspondiente al sistema estudiado en este contexto [17].

6.1.1. Cálculo de la solución

Las ecuaciones para $l = 1$ y $l = 2$ de (6.16) son las más importantes, pues las ecuaciones para l mayores se asocian a interacciones entre varias partículas, las cuales son débiles para la aproximación de suspensiones diluidas utilizada en este modelo. Es por esto que se trabajará con estas dos ecuaciones.

Se utilizará la notación $\tilde{f}_1 = \tilde{f}(\vec{x}_1)$, $\tilde{f}_{1,2} = \tilde{f}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ y $\tilde{f}_{1,2,3} = \tilde{f}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$.

$l = 1]$

$$\vec{\nabla}_{x_1} \tilde{f}_1 = -\vec{\nabla}_{x_1} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) \tilde{f}_{1,2} d^2 x_2 \quad (6.17)$$

Se utiliza a continuación el supuesto de suspensión homogénea, ya utilizado anteriormente en la tesis. Esto implica que $\tilde{f}_{1,2}$ no depende de la posición de cada una de las partículas, sino que del vector separación, *i.e.*, $\tilde{f}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \tilde{f}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \equiv \tilde{f}(\vec{x}_{12})$. La ecuación (6.17) queda

$$\vec{\nabla}_{x_1} \tilde{f}_1 = -\vec{\nabla}_{x_1} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) \tilde{f}(\vec{x}_{12}) d^2 x_2$$

Gracias a que se integra en todo el espacio, en vez de integrar en el vector \vec{x}_2 se puede integrar en \vec{x}_{12} . Se observa que

$$\int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) \tilde{f}(\vec{x}_{12}) d^2 x_{12} = \mathbb{C}$$

donde \mathbb{C} es un tensor constante. De esta manera (6.17) queda

$$\vec{\nabla}_{x_1} \tilde{f}_1 = -\vec{\nabla}_{x_1} \cdot \mathbb{C} = 0 \quad (6.18)$$

Lo cual implica que \tilde{f}_1 es constante, *i.e.*, $\tilde{f}_1 \equiv n$, con n la densidad promedio de la suspensión.

$l = 2]$

$$\vec{\nabla}_{x_1} \tilde{f}_{12} + \vec{\nabla}_{x_1} \cdot (\widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) \tilde{f}_{12}) = -\vec{\nabla}_{x_1} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) \tilde{f}_{1,2,3} d^2 x_3 \quad (6.19)$$

Con $\tilde{f}_{12} = \tilde{f}(\vec{x}_{12})$. Es preferible hacer el siguiente cambio en la divergencia al lado izquierdo de (6.19)

$$\vec{\nabla}_{x_1} \tilde{f}_{12} + \vec{\nabla}_{x_1} \cdot (\widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) \tilde{f}_{12}) = \vec{\nabla}_{x_{12}} \tilde{f}_{12} + \vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot (\widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) \tilde{f}_{12})$$

Esto gracias a que las funciones del lado izquierdo sólo dependen de $\vec{x}_{12} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$. Luego, el lado derecho de (6.19) ha de ser también una función de \vec{x}_{12} , de manera que se cumpla la igualdad. ¿Se cumple esto en realidad?

Para verificarlo, se utilizará la expresión para $\tilde{f}_{1,2,3}$ antes utilizada (recordar el cálculo de la velocidad terminal en el capítulo 4).

$$f_{1,2,3} = n^3 [1 + h_{12}^{(2)} + h_{13}^{(2)} + h_{23}^{(2)} + h_{12,13}^{(3)}]$$

lo que equivale a

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{1,2,3} &= a^6 n^3 [1 + h_{12}^{(2)} + h_{13}^{(2)} + h_{23}^{(2)} + h_{12,13}^{(3)}] \\ \tilde{f}_{1,2,3} &= \varphi^3 [1 + h_{12}^{(2)} + h_{13}^{(2)} + h_{23}^{(2)} + h_{12,13}^{(3)}] \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} \varphi &\equiv \frac{\Phi}{\pi} = \frac{n\pi a^2}{\pi} \\ h_{pq}^{(2)} &= h^{(2)}(\vec{x}_p - \vec{x}_q) \quad (p, q = 1, 2, 3) \\ h_{12,13}^{(3)} &= h^{(3)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2, \vec{x}_1 - \vec{x}_3) \end{aligned}$$

Luego, la integral del lado derecho de (6.19) es equivalente a

$$\int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13})[1 + h_{12}^{(2)} + h_{13}^{(2)} + h_{23}^{(2)} + h_{12,13}^{(3)}] d^2 x_3 =$$

$$\underbrace{\int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) d^2 x_3}_{I_1} + \underbrace{h_{12}^{(2)} \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) d^2 x_3}_{I_2} + \underbrace{\int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) h_{13}^{(2)} d^2 x_3}_{I_3} + \underbrace{\int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) h_{23}^{(2)} d^2 x_3}_{I_4} + \underbrace{\int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) h_{12,13}^{(3)} d^2 x_3}_{I_5}$$

Realizando el cambio de variable de integración de \vec{x}_3 a \vec{x}_{13} , es simple darse cuenta de que I_1 es un tensor constante como también I_3 , por lo que no requieren mayor análisis; la integral en I_2 es constante, por lo que este término es una función de \vec{x}_{12} . Con respecto a los demás términos,

I_4]

$$\int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) h^{(2)}(\vec{x}_2 - \vec{x}_3) d^2 x_3 = \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) h^{(2)}(\vec{x}_2 - \vec{x}_1 + \vec{x}_1 - \vec{x}_3) d^2 x_3$$

$$= \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) h^{(2)}(-\vec{x}_{12} + \vec{x}_{13}) d^2 x_{13}$$

Por lo tanto, al integrar en \vec{x}_{13} queda una función solamente de \vec{x}_{12} .

I_5] Al realizar el mismo cambio de variable, se obtiene

$$\int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) h_{12,13}^{(3)} d^2 x_{13}$$

Claramente depende sólo de \vec{x}_{12} .

Se concluye, entonces, que todos los términos en (6.19) dependen de \vec{x}_{12} , por lo que es mejor escribir los gradientes y divergencias en función de \vec{x}_{12} .

$$\vec{\nabla}_{x_{12}} \tilde{f}_{12} + \vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot (\widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) \tilde{f}_{12}) = -\vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) \tilde{f}_{1,2,3} d^2 x_3 \quad (6.20)$$

Como se puede apreciar, no hay ninguna dirección privilegiada en (6.20). Es cierto que el problema claramente posee una dirección que se destaca, aquella dada por la gravedad; sin embargo, esta información estaba incorporada en el vector \vec{W} , el cual fue eliminado de la ecuación pues no aportaba información. Una importante conclusión se obtiene de esto: la ecuación (6.20) predice una función distribución *isótropa*. Este resultado no concuerda con ciertos estudios para sistemas en tres dimensiones que indican una anisotropía en la correlación de pares [25, 28, 29]; sin embargo, dado que se utiliza un modelo bastante simple es razonable esperar una predicción para la función distribución que no sea más que una aproximación de primer orden.

Para poder seguir trabajando, es necesario un modelo para $f_{1,2,3}$. Primero que nada, se escribirá explícitamente la importante condición de volumen excluido mediante la función *Heaviside* o *escalón* $\theta(x)$.

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \quad (6.21)$$

De esta manera, se procede a redefinir la función distribución de tríos de la siguiente manera

$$\tilde{f}_{1,2,3} \rightarrow \theta(\|\vec{x}_{12}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{13}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{23}\| - 2a) \tilde{f}_{1,2,3}$$

Así aparece explícitamente la condición de no traslape entre las partículas 1, 2 y 3. Lo mismo podría hacerse para la función distribución de pares, pero esto no es necesario; dado que se sabe que no puede haber traslape entre las partículas y que debe cumplirse que $f_{12} = 0$ para $\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\| = \|\vec{x}_{12}\| < 2a$, es suficiente restringirse a trabajar con la ecuación (6.20) en la región del espacio $\|\vec{x}_{12}\| > 2a$. Luego, se extiende la solución a todo el espacio imponiendo el valor que la función debe tener en la región $\|\vec{x}_{12}\| < 2a$.

Aproximación de orden cero

La expansión para la función distribución de tríos se escribe ahora de la siguiente forma

$$\tilde{f}_{1,2,3} = \theta(\|\vec{x}_{12}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{13}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{23}\| - 2a) \varphi^3 [1 + h_{12}^{(2)} + h_{13}^{(2)} + h_{23}^{(2)} + h_{12,13}^{(3)}]$$

Usando la expresión análoga para la función distribución de pares, *i.e.*, $\tilde{f}_{12} = \varphi^2 [1 + h_{12}^{(2)}]$ en (6.20) se obtiene

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{x_{12}} h_{12}^{(2)} + \vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot (\widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) h_{12}^{(2)}) + \vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) &= \\ -\varphi \vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) \theta(\|\vec{x}_{12}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{13}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{23}\| - 2a) [1 + h_{12}^{(2)} + h_{13}^{(2)} + h_{23}^{(2)} + h_{12,13}^{(3)}] d^2 x_3 & \end{aligned} \quad (6.22)$$

El término $\vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12})$ corresponde a un vector; la k -ésima componente de este vector corresponde a

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}))_{ik} = \frac{-2x_k}{(x_\alpha x_\alpha - 1)^2}$$

Escrito en forma vectorial,

$$\vec{\nabla}_x \cdot \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}) = \frac{-2\vec{x}}{(\|\vec{x}\|^2 - 1)^2} \equiv \vec{V}(\vec{x}) \quad (6.23)$$

Como $\vec{\nabla} \cdot (\widehat{\mathbb{T}} \tilde{h}^{(2)}) = \vec{\nabla} h^{(2)} \cdot \widehat{\mathbb{T}} + h^{(2)} \vec{\nabla} \cdot \widehat{\mathbb{T}} = \vec{\nabla} h^{(2)} \cdot \widehat{\mathbb{T}} + h^{(2)} \vec{V}$, la ecuación (6.22) se puede escribir de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{x_{12}} h_{12}^{(2)} + (\vec{\nabla}_{x_{12}} h_{12}^{(2)}) \cdot \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) + h_{12}^{(2)} \vec{V}(\vec{x}_{12}) &= \\ -\vec{V}(\vec{x}_{12}) - \varphi \vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) \theta(\|\vec{x}_{12}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{13}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{23}\| - 2a) [1 + h_{12}^{(2)} + h_{13}^{(2)} + h_{23}^{(2)} + h_{12,13}^{(3)}] d^2 x_3 & \end{aligned} \quad (6.24)$$

La aproximación de primer orden corresponde a despreciar las interacciones de tríos (equivalente a imponer $h^{(3)} = 0$), con lo cual (6.24) queda

$$\begin{aligned} & \vec{\nabla}_{x_{12}} h_{12}^{(2)} + (\vec{\nabla}_{x_{12}} h_{12}^{(2)}) \cdot \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) + h_{12}^{(2)} \vec{V}(\vec{x}_{12}) \simeq \\ & -\vec{V}(\vec{x}_{12}) - \varphi \vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) \theta(\|\vec{x}_{12}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{13}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{23}\| - 2a) [1 + h_{12}^{(2)} + h_{13}^{(2)} + h_{23}^{(2)}] d^2 x_3 \end{aligned} \quad (6.25)$$

Esta ecuación se puede resolver numéricamente. Sin embargo, al considerar una aproximación más se puede obtener una solución analítica. La aproximación de orden cero con que se empezará para resolver la ecuación (6.20) es despreciar las funciones correlaciones de pares $h^{(2)}$ y la de tríos $h^{(3)}$, *i.e.*, sólo se considerará el volumen excluido.

$$\tilde{f}_{1,2,3} \approx \theta(\|\vec{x}_{12}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{13}\| - 2a) \theta(\|\vec{x}_{23}\| - 2a) \varphi^3 \quad (6.26)$$

Un poco más simple resulta trabajar con una ecuación escalar que vectorial; recordando que el gradiente se puede escribir de la siguiente manera: $\vec{\nabla}_{x_{12}} = \hat{x}_{12} \frac{\partial}{\partial x_{12}}$, se procede a hacer producto punto a ambos lados de la ecuación (6.25) con \hat{x}_{12} , y despreciar las correlaciones de pares en la integral. El resultado es

$$\begin{aligned} & \frac{d h_{12}^{(2)}}{d x_{12}} + \left(\frac{d h_{12}^{(2)}}{d x_{12}} \right) \hat{x}_{12} \cdot \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{12}) \cdot \hat{x}_{12} + h_{12}^{(2)} \vec{V}(\vec{x}_{12}) \cdot \hat{x}_{12} \simeq \\ & -\vec{V}(\vec{x}_{12}) \cdot \hat{x}_{12} - \varphi \left[\vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) \theta(x_{13} - 2a) \theta(x_{23} - 2a) d^2 x_3 \theta(x_{12} - 2a) \right] \cdot \hat{x}_{12} \end{aligned} \quad (6.27)$$

Se analizará cada término por separado, usando notación tensorial cuando ello facilite el cálculo.

▪

$$\begin{aligned} \hat{x} \cdot \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}) \cdot \hat{x} & \Leftrightarrow \hat{x}_i (\widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}))_{ik} \hat{x}_k \\ & = \hat{x}_i \left\{ \frac{\delta_{ik}}{x^4 - 1} - \frac{x^4}{x^4 - 1} \left[\frac{\delta_{ik}}{x^2} - 2 \frac{\hat{x}_i \hat{x}_k}{x^2} \right] \right\} \hat{x}_k \\ & = \frac{1}{\|\vec{x}\|^2 - 1} \end{aligned}$$

▪

$$\begin{aligned} \vec{V}(\vec{x}) \cdot \hat{x} & = \frac{-2\vec{x}}{(\|\vec{x}\|^2 - 1)^2} \cdot \hat{x} \\ & = \frac{-2x}{(x^2 - 1)^2} \end{aligned}$$

▪ Queda analizar el término integral

$$\begin{aligned} & \vec{\nabla}_{x_{12}} \cdot \left\{ \int \widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}) \theta(x_{13} - 2a) \theta(x_{23} - 2a) d^2 x_3 \theta(x_{12} - 2a) \right\} \cdot \hat{x}_{12} \Leftrightarrow \\ & \frac{\partial}{\partial (x_{12})_\alpha} \left\{ \int (\widehat{\mathbb{T}}(\vec{x}_{13}))_{\alpha\beta} \theta(x_{13} - 2a) \theta(x_{23} - 2a) d^2 x_3 \theta(x_{12} - 2a) \right\} (\hat{x}_{12})_\beta \end{aligned} \quad (6.28)$$

Dado que $\widehat{\mathbf{T}}$ es un tensor simétrico, el resultado de la integral también será un tensor simétrico. Considerando además que ha de ser una función de $\|\vec{x}_{12}\| = x_{12}$ por lo ya antes analizado, se concluye que la integral en la expresión (6.28) es equivalente a

$$t^{(1)}(x_{12})\delta_{\alpha\beta} + t^{(2)}(x_{12})(\vec{x}_{12})_{\alpha}(\vec{x}_{12})_{\beta} \quad (6.29)$$

donde $t^{(1)}$ y $t^{(2)}$ son funciones que se pueden calcular numéricamente. Luego, reemplazando (6.29) en (6.28) se obtiene³

$$\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left\{ t^{(1)}(x)\delta_{\alpha\beta} + t^{(2)}(x)x_{\alpha}x_{\beta} \right\} \hat{x}_{\beta} \quad (6.30)$$

Notando que, gracias a la regla de la cadena,

$$\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} t^{(1)}(x) = t'^{(1)} \frac{\partial x}{\partial x_{\alpha}}$$

donde la prima indica la derivada con respecto al argumento; además, como $x = \sqrt{x_{\gamma}x_{\gamma}}$ y

$$\frac{\partial \sqrt{x_{\gamma}x_{\gamma}}}{\partial x_{\alpha}} = \frac{2x_{\gamma}\delta_{\gamma\alpha}}{2\sqrt{x_{\gamma}x_{\gamma}}} = \hat{x}_{\alpha}$$

se tiene que, al usar estos resultados en (6.30),

$$\begin{aligned} & t'^{(1)}(x)\hat{x}_{\alpha}\delta_{\alpha\beta}\hat{x}_{\beta} + t'^{(2)}(x)\hat{x}_{\alpha}x_{\alpha}x_{\beta}\hat{x}_{\beta} + t^{(2)}(x)x_{\beta}\hat{x}_{\beta} + t^{(2)}(x)x_{\alpha}\delta_{\alpha\beta}\hat{x}_{\beta} \\ & \Leftrightarrow \\ & t'^{(1)}(x) + t'^{(2)}(x)\|\vec{x}\|^2 + 2t^{(2)}(x)\|\vec{x}\| \end{aligned} \quad (6.31)$$

Reemplazando estos resultados en (6.27),

$$\begin{aligned} & \frac{d h_{12}^{(2)}}{d x_{12}} + \frac{d h_{12}^{(2)}}{d x_{12}} \left(\frac{1}{x_{12}^2 - 1} \right) + h_{12}^{(2)} \left(\frac{-2x_{12}}{(x_{12}^2 - 1)^2} \right) = \\ & - \left(\frac{-2x_{12}}{(x_{12}^2 - 1)^2} \right) - \varphi \left(t'^{(1)}(x_{12}) + t'^{(2)}(x_{12})x_{12}^2 + 2t^{(2)}(x_{12})x_{12} \right) \end{aligned} \quad (6.32)$$

Para simplificar la notación, se reemplaza x_{12} por x simplemente, y se procede a definir

$$f_1(x) = \frac{1}{x^2 - 1} \quad ; \quad f_2(x) = \frac{-2x}{(x^2 - 1)^2} \quad ; \quad f_3(\vec{x}) = t'^{(1)}(x) + t'^{(2)}(x)x^2 + 2t^{(2)}(x)x$$

De esta manera, la ecuación diferencial (6.32) queda

$$h' + h' f_1 + h f_2 = -f_2 - \varphi f_3$$

³Se omite el subíndice “12” del vector para simplificar la notación.

donde las primas nuevamente indican derivada con respecto al argumento. Esta ecuación se puede escribir como

$$h' + h \frac{f_2}{1+f_1} = \frac{-f_2}{1+f_1} + \frac{-\varphi f_3}{1+f_1} \quad (6.33)$$

Si se define

$$F(x) = \int \frac{f_2(x)}{1+f_1(x)} dx = \int \frac{-2}{x(x^2-1)} dx = \log\left(\frac{x^2}{x^2-1}\right) \quad (6.34)$$

Se puede entonces multiplicar (6.33) por $\exp(F(x))$ de manera de obtener

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} (h e^F) &= \frac{-f_2}{1+f_1} e^F + \frac{-\varphi f_3}{1+f_1} e^F \quad / \int dx \\ h(x) &= h_0 e^{-F(x)} - \int^x e^{-(F(x)-F(y))} \frac{f_2(y) + \varphi f_3(y)}{1+f_1(y)} dy \\ h(x) &= h_0 e^{-F(x)} - \int^x G(x-y) \frac{f_2(y) + \varphi f_3(y)}{1+f_1(y)} dy \end{aligned} \quad (6.35)$$

donde $G(x-y) = \exp\{-(F(x)-F(y))\}$ corresponde a la función de Green del problema estudiado.

Aplicando la condición de borde se puede determinar la constante h_0 , i.e., $\lim_{x \rightarrow \infty} h(x) = 0$. Sin embargo, usando la expresión (6.34) para F , se tiene que

$$\exp(-F(x)) = \exp\left[-\log\left(\frac{x^2}{x^2-1}\right)\right] = \frac{x^2-1}{x^2}$$

Expresión que converge a 1 con $x \rightarrow \infty$. Luego, la condición de borde es equivalente a

$$\begin{aligned} 0 &= h_0 - \int^{\infty} e^{F(y)} \frac{f_2(y) + \varphi f_3(y)}{1+f_1(y)} dy \\ h_0 &= \int^{\infty} e^{F(y)} \frac{f_2(y) + \varphi f_3(y)}{1+f_1(y)} dy \end{aligned} \quad (6.36)$$

Habiendo determinado h_0 , se concluye que finalmente se ha llegado a la solución para la función correlación de pares.

■ *Límite de suspensión infinitamente diluida*

Simplemente con el objetivo de verificar la validez física del resultado obtenido, se puede estudiar el límite de una suspensión infinitamente diluida, que corresponde a imponer $\varphi = 0$ en (6.35). Se obtiene entonces

$$\begin{aligned} h(x) &= h_0 e^{-F(x)} - e^{-F(x)} \int^x e^{F(y)} \frac{f_2(y)}{1+f_1(y)} dy \\ &= h_0 e^{-F(x)} - e^{-F(x)} \int^x \frac{d}{dy} (e^{F(y)}) dy = h_0 e^{-F(x)} - 1 \end{aligned} \quad (6.37)$$

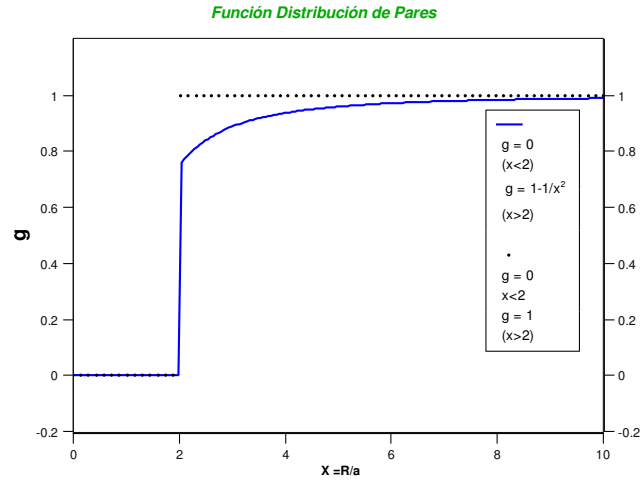


Figura 6.1: Función distribución de pares obtenida en el límite de una suspensión infinitamente diluida (ecuación (6.39), línea continua), en comparación con la aproximación de considerar sólo el volumen excluido utilizada anteriormente (ecuación (4.58), puntos).

Reemplazando la expresión (6.34) para $F(x)$ en (6.37), se concluye que

$$h(x) = h_0 \frac{x^2 - 1}{x^2} - 1$$

Nuevamente se aplica la condición de borde para determinar la constante h_0 .

$$\lim_{x \rightarrow \infty} h(x) = 0 = h_0 - 1$$

i.e., $h_0 = 1$. Finalmente,

$$h(x) = -\frac{1}{x^2} \tag{6.38}$$

Expresión válida para $R > 2a$, siendo $h = -1$ para $R < 2a$. Luego, en variables dimensionales, la función distribución de pares $g = 1 + h$ corresponde a

$$g(R) = \begin{cases} 1 - \frac{a^2}{R^2} & R > 2a \\ 0 & R < 2a \end{cases} \tag{6.39}$$

Como se puede apreciar de la expresión (6.39) y del gráfico 6.1, $g(R)$ presenta un valor levemente menor para $R \sim O(a)$ en comparación con el caso en que solamente se considera el volumen excluido por las esferas (expresión (4.58), $g(\vec{R}) = \theta(R - 2a)$). Esto significa que en la cercanía de una partícula de prueba hay un número promedio de partículas menor que en el caso de interacciones sólo por contacto.

Con esta nueva expresión para g , es posible el calcular un nuevo valor de la velocidad terminal. Recordando el resultado obtenido en el capítulo 4 (ecuación (4.83), sin los términos que se anulan),

$$\langle \vec{d} \rangle \approx \vec{w} + n \int g^{(2)}(\vec{R}) A(R) d^2 R \vec{w}$$

Utilizando la solución a sexto orden para $A(R)$ que aparece en (4.89) para calcular la integral anterior,

$$A(X) = \left(\frac{a}{X}\right)^4 - 2\left(\frac{a}{X}\right)^6 + \left(\frac{a}{X}\right)^8 - 6\left(\frac{a}{X}\right)^{10} + 17\left(\frac{a}{X}\right)^{12} - 28\left(\frac{a}{X}\right)^{14} + 48\left(\frac{a}{X}\right)^{16} - 134\left(\frac{a}{X}\right)^{18} \\ + 216\left(\frac{a}{X}\right)^{20} - 162\left(\frac{a}{X}\right)^{22}$$

el resultado obtenido es

$$\langle \vec{d} \rangle = \vec{w} + \lambda \Phi \vec{w} \quad (6.40)$$

con $\lambda \simeq 0,168$ para simplificar la notación. Luego,

$$\begin{aligned} \langle \vec{U} \rangle &= 2\langle \vec{d} \rangle - \vec{w} \\ \langle \vec{U} \rangle &= 2(\vec{w} + \lambda \Phi \vec{w}) - \vec{w} \\ \langle \vec{U} \rangle &= \vec{w} + 2\lambda \Phi \vec{w} \\ \langle \vec{U} \rangle &\simeq \vec{w}(1 + 0,336 \Phi) \end{aligned} \quad (6.41)$$

Comparando con el resultado usando sólo consideraciones de volumen excluido (*i.e.*, $g(\vec{R}) = \theta(R - 2a)$),

$$\langle \vec{U} \rangle_{\text{no traslape}} \approx \vec{w}(1 + 0,378 \Phi)$$

Como se puede apreciar, la nueva velocidad terminal es levemente menor; incluso en el límite de suspensión infinitamente diluida, el carácter de largo alcance de las interacciones hidrodinámicas afecta las propiedades de la suspensión. Resulta interesante relacionar el presente resultado con la naturaleza de las interacciones hidrodinámicas de campo lejano y la nueva expresión para g .

El campo lejano tiende a alejar a las partículas entre sí, y es por esta razón que g tiene un valor levemente menor que considerando solamente volumen excluido. En otras palabras, es menos probable encontrar una partícula cercana a la partícula de prueba considerada. Ya que el principal aporte en la integral que aparece en el cálculo de la velocidad terminal está dado por la región en que $R \sim O(a)$, el menor valor de g conduce directamente a un menor valor de la velocidad terminal. Físicamente uno podría interpretar esto mediante el siguiente análisis [16]: si se toma un volumen V rodeando a una partícula de prueba, este volumen tiene una densidad de partículas $\Delta\rho$ menor que en el caso de sólo volumen excluido (por lo antes explicado). Esta menor densidad está directamente asociada a un peso menor $mgV\Delta\rho$ de este volumen, y un menor peso es una menor fuerza descendente sobre este volumen; luego, esto conduce a una menor velocidad promedio para este volumen.

Capítulo 7

Conclusiones

En esta tesis se ha estudiado la física de suspensiones en un sistema cuasi-bidimensional, considerando partículas no Brownianas inmersas en un fluido viscoso confinado entre dos paredes infinitas. Los parámetros y geometría considerados implican un número de Reynolds muy pequeño, lo cual permitió deducir que la dinámica del fluido para separaciones grandes entre partículas era descrita por el modelo de Hele-Shaw, considerando las apropiadas condiciones de borde, *i.e.*, la interacción fluido-partículas.

El objetivo principal es obtener un modelo adecuado para describir las interacciones de campo lejano entre las partículas. Siguiendo la misma línea de análisis que la Dra. Álvarez usó en su tesis [1], se obtuvo una solución aproximada para la presión del fluido, a partir de la cual se calcularon su velocidad y la fuerza sobre las partículas; por lo tanto, al tener las fuerzas sobre las partículas se puede estudiar su dinámica. El modelo obtenido se denominó *modelo cuadrupolar*.

La fuerza de campo lejano obtenida resulta de un efecto del flujo producido por la misma partícula al desplazarse en el fluido, y además de la *interacción hidrodinámica* entre esta partícula y todas las demás del sistema. Esta interacción es de largo alcance, decayendo como R^{-2} a largas distancias, más rápido que en sistemas tridimensionales, en que las interacciones decaen como R^{-1} . Otro fenómeno distintivo de suspensiones bidimensionales es el anti-arrastre o “antidrag” que presenta la fuerza hidrodinámica, también presente en este modelo.

El siguiente objetivo de la tesis correspondió a calcular propiedades de una suspensión bidimensional precipitando debido al efecto de la gravedad, *i.e.*, el estudio de la *sedimentación*. Se dedujo que, al igual que en el caso tridimensional, la naturaleza de largo alcance de las interacciones hidrodinámicas conduce a integrales divergentes al momento de calcular promedios en el sistema (en forma específica, a integrales condicionalmente convergentes para el caso bidimensional). Para desarrollar un modelo consistente que no presente problemas de convergencia se incorporó la presencia de paredes en el sistema; físicamente, al incorporar paredes perpendiculares a la dirección en que sedimentan las partículas se introduce un contraflujo ascendente que compensa el flujo descendente debido al proceso de sedimentación. Para aplicar las condiciones de borde adecuadas en estas paredes se utilizó el método de imágenes de electrostática.

Gracias a un manejo algebraico de los resultados obtenidos, se logró recuperar la misma forma funcional del modelo cuadrupolar, considerando ahora un tensor de interacciones modificado y un tensor que considera el efecto que la misma partícula produce al sedimentar en el sistema. En estos tensores está implícitamente incorporada la información de la geometría del sistema. Sin embargo, todavía existe una dificultad debido a que el tensor de interacciones presenta una divergencia en el origen; debido a esto se presenta un método específico que permite realizar los cálculos sin divergencias.

Dado que ya se posee un modelo adecuado para describir el sistema estudiado, se calculó la velocidad terminal o de sedimentación, utilizando tanto el modelo dipolar desarrollado en [1] como el modelo cuadrupolar. La complejidad del análisis condujo a restringir el estudio a suspensiones diluidas lejanas de las paredes. Se obtiene finalmente una solución correcta a primer orden en la fracción del área Φ ocupada por las partículas. Consecuentemente se procedió a calcular la desviación estándar de la velocidad, en forma análoga a los cálculos antes realizados. Una importante conclusión deducida al analizar el desarrollo y las expresiones obtenidas que determinan la velocidad terminal y sus fluctuaciones es que éstas *no* dependen del tamaño ni de la geometría del sistema (en el régimen de suspensiones diluidas en un sistema suficientemente grande como para considerar partículas alejadas de las paredes).

Comparando las predicciones del modelo dipolar para la velocidad terminal y su desviación estándar con aquellas dadas por el modelo cuadrupolar, se aprecia que, a pesar de que claramente difieren para el caso de la velocidad terminal, son del mismo orden de magnitud y además las desviaciones estándar son muy similares. Esto conduce a dos conclusiones: que el modelo dipolar logra rescatar la dinámica principal de las suspensiones, y que la corrección dada por el modelo cuadrupolar no es despreciable.

Los cálculos antes mencionados condujeron a expresiones que dependen de la función distribución de pares de partículas $g^{(2)}$, por lo que la precisión de las predicciones del modelo cuadrupolar para la velocidad terminal y de sedimentación van a depender de qué tan bueno sea el modelo de $g^{(2)}$ utilizado para el cálculo. En los capítulos (4) y (5) se utilizó simplemente una consideración de volumen excluido (*i.e.*, las partículas no se traslapan); con el objetivo de poder tener mejores resultados, se procedió a calcular una corrección de primer orden a la aproximación anterior para $g^{(2)}$. Para ello, se comenzó desde la base de la Mecánica Estadística de No Equilibrio utilizando la Ecuación de Liouville.

Se logró obtener un resultado analítico en el caso particular de una suspensión infinitamente diluida, cuya expresión incorpora el hecho de que las interacciones hidrodinámicas de campo lejano entre las partículas tienden a alejarlas entre sí. Debido a esto el número efectivo de partículas cercanas a una partícula de prueba en una suspensión es menor que aquel en un sistema con interacciones sólo por contacto (esto sin considerar las interacciones de campo cercano). Finalmente, se procedió a calcular un nuevo valor para la velocidad terminal usando este nuevo modelo para $g^{(2)}$.

7.1. Temas por desarrollar

En el estudio de las suspensiones y del proceso de sedimentación ciertamente hay una gran gama de problemas muy interesantes que se pueden abordar y que no fueron incluidos en esta tesis. En particular, hay ciertos temas que sería interesante considerar, como por ejemplo

- **Proseguir con la expansión en la serie de Fourier.**

El modelo cuadrupolar podría ser mejorado aún más si más términos de la serie de Fourier son tomados en cuenta. La complejidad de los cálculos involucrados limitó el análisis hasta el término cuadrupolar.

Sería interesante verificar qué tan preciso es el modelo cuadrupolar comparando las predicciones para la velocidad terminal mediante un modelo con más términos en la expansión. También se ha de notar que en el desarrollo del modelo cuadrupolar aparecieron ciertas “coincidencias” muy interesantes, en el sentido de que al deducir las expresiones para la presión,

velocidad y fuerza hidrodinámicas, los mismos tensores aparecían una y otra vez. Sería muy interesante verificar si en realidad corresponde a algo más que una simple coincidencia.

■ **Partículas esféricas**

En el desarrollo del modelo cuadrupolar se consideraron discos como partículas dado que esto simplifica los cálculos, con la ventaja de que para las interacciones hidrodinámicas de campo lejano esto no es tan relevante. Esto debido a que para el modelo de Hele-Shaw (el que corresponde para el estudio del campo lejano) la geometría específica de las partículas no es tan importante. Sin embargo, dado que en experimentos se utilizan esferas como partículas, sería deseable modificar el modelo cuadrupolar para considerar esferas en vez de discos.

■ **Interacciones de campo cercano**

En una suspensión diluida, las interacciones predominantes en el sistema corresponden a las fuerzas de campo lejano (partículas distantes unas de otras); sin embargo, a medida que se consideran suspensiones más densas, los casos con partículas cercanas entre sí son cada vez más frecuentes y las fuerzas de campo cercano han de ser incluidas en el modelo. Por lo tanto, si se desea tener un modelo más preciso es necesario calcular estas fuerzas mediante la teoría de lubricación; esta teoría es bien conocida y no debería ser complejo incorporar este efecto en el modelo. Cabe mencionar que sería recomendable realizar el cálculo inmediatamente para esferas en vez de discos, pues para el campo cercano la geometría sí es importante; luego, considerar discos conduciría a resultados claramente distintos.

■ **Estudio de la difusión.**

El proceso difusivo que sigue una partícula en una suspensión debido a las interacciones hidrodinámicas es un tema que ha recibido bastante atención; sería interesante abordar este problema y comparar las predicciones para sistemas cuasi-bidimensionales con los resultados obtenidos en tres dimensiones. Cabe mencionar, además, que el estudio de las fluctuaciones está relacionado con el de la difusión.

■ **Cálculo numérico de la función distribución de pares.**

En el capítulo 6 se obtuvo un resultado analítico para la función distribución de pares $g^{(2)}$ considerando un límite muy particular que simplificaba la ecuación a resolver. Sin embargo, es posible obtener un mejor modelo para $g^{(2)}$ resolviendo numéricamente las ecuaciones que surgen. En particular, las funciones $t^{(1)}$ y $t^{(2)}$ se pueden calcular numéricamente, y la ecuación (6.25) también se puede resolver utilizando métodos numéricos. De esta manera se obtendría un modelo más preciso, además de ser válido para suspensiones más densas.

■ **Simulaciones**

Uno de los objetivos que buscaba la tesis en [1] era desarrollar un modelo teórico que fuese más eficiente (en términos computacionales) que otros modelos, al momento de realizar simulaciones numéricas de suspensiones; así llegó a crear el modelo dipolar. El modelo cuadrupolar desarrollado en esta tesis buscaba estudiar qué tan preciso es el modelo dipolar de [1], lo que en cierta medida se logró comparando las predicciones de ambos modelos para la velocidad terminal y su desviación estándar. Sin embargo, también sería muy deseable realizar simulaciones numéricas y comparar la dinámica que muestra una suspensión descrita

por el modelo dipolar con una descrita por el modelo cuadrupolar. Para ello, sería necesario incorporar la fuerza de lubricación y también sería muy deseable considerar partículas esféricas, de modo que las simulaciones se asemejen más a los experimentos.

Apéndice A

Relaciones entre tensores

En esta sección se presentan relaciones útiles entre los tensores utilizados ¹ :

▪

$$(\mathbb{K}_{ik})_{pm} (\mathbb{K}_{ki})_{ml} = \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^4 \delta_{pl} \quad (\text{A.1})$$

▪

$$(\mathbb{L}_{ik})_{pnl} (\mathbb{L}_{ki})_{nl\lambda} = -2 \left(\frac{a_k}{R_{ik}} \right)^6 \delta_{p\lambda} \quad (\text{A.2})$$

▪

$$(\mathbb{L}_{ik})_{pln} (\mathbb{N}_{ki})_{ln\lambda\nu} (\mathbb{L}_{ik})_{\lambda\nu\gamma} = -6 \left(\frac{a_i a_k^7}{R_{ik}^8} \right) (\mathbb{K}_{ik})_{p\gamma} \quad (\text{A.3})$$

▪

$$(\mathbb{N}_{ik})_{lnpq} (\mathbb{L}_{ki})_{pq\lambda} (\mathbb{K}_{ik})_{\lambda\nu} = 3 \left(\frac{a_i a_k^5}{R_{ik}^6} \right) (\mathbb{L}_{ik})_{ln\nu} \quad (\text{A.4})$$

▪

$$(\mathbb{N}_{ik})_{lnpq} (\mathbb{N}_{ki})_{pq\lambda\nu} (\mathbb{L}_{ik})_{\lambda\nu\gamma} = 9 \left(\frac{a_i^2 a_k^6}{R_{ik}^8} \right) (\mathbb{L}_{ik})_{ln\gamma} \quad (\text{A.5})$$

Al observar las ecuaciones (A.4) y (A.5) se deduce que se cumple la siguiente relación:

$$\mathbb{N}_{ik} \mathbb{N}_{ki} \mathbb{L}_{ik} = 3 \left(\frac{a_i a_k}{R_{ik}^2} \right) \mathbb{N}_{ik} \mathbb{L}_{ki} \mathbb{K}_{ik} \quad (\text{A.6})$$

¹Se utiliza la convención de que índices repetidos se suman

Apéndice B

Cálculo de $\sigma(U_y)$ usando el modelo dipolar

Como se mencionó al momento de calcular $\sigma(U_y)$ mediante el modelo dipolar (ver página 82), se calculará explícitamente $\sigma(U_y)$ mediante el mismo método con el que se obtuvo el resultado (5.51), con el objetivo de analizar qué tanto difiere el resultado que se obtendrá en comparación a (5.53). Se tiene que

$$\begin{aligned} U_{iy} &= 2d_{iy} - w \\ U_{iy}^2 &= 4d_{iy}^2 + w^2 - 4d_{iy}w \\ \langle U_y^2 \rangle &= 4\langle d_y^2 \rangle + w^2 - 4\langle d_y \rangle w \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

De aquí que

$$\begin{aligned} \sigma(U_y) &= \sqrt{\langle U_y^2 \rangle - \langle U_y \rangle^2} = \sqrt{4\langle d_y^2 \rangle + w^2 - 4\langle d_y \rangle w - [2\langle d_y \rangle - w]^2} \\ &= \sqrt{4\langle d_y^2 \rangle - 4\langle d_y \rangle^2} = 2\sigma(d_y) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

El cálculo de $\sigma(d_y)$ es muy similar al de $\sigma(d_x)$, por lo que no se explicitarán todos los detalles.

De la misma manera en que antes se pudo considerar $\hat{x} \iff \delta_{1\mu}$ en el cálculo de $\sigma(d_x)$, se usará $\hat{y} \iff \delta_{2\mu}$

$$\begin{aligned} \vec{d}_i &= \vec{w} - \sum_{k \neq i} \tilde{\mathbb{K}}_{i;k} \vec{w} + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})^q \vec{w} \quad / \cdot \hat{y} \\ d_{iy} &= w - \sum_{k \neq i} \delta_{2\mu} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{\mu\nu} \delta_{\nu 2} w + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q \delta_{2\mu} [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{\mu\nu} \delta_{\nu 2} w \\ d_{iy} &= w - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{22} w + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{22} w \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Elevando al cuadrado, despreciando las sumas dobles y aproximando $(\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})^c \approx (\mathbb{K}_{ik})^c$ para $c \geq 2$.

$$\begin{aligned}
d_{iy}^2 &= \left\{ w - \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{22} w + \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{22} w \right\} \left\{ w - \sum_{l \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;l})_{22} w + \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{l \neq i} (-1)^p [(\mathbb{K}_{il})^p]_{22} w \right\} \\
&= w^2 - 2w^2 \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{22} + 2w^2 \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{22} + w^2 \sum_{k \neq i} [(\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{22}]^2 \\
&- 2w^2 \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{22} [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{22} + w^2 \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^{q+p} [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{22} [(\mathbb{K}_{ik})^p]_{22} + O(\Phi^2) \\
&\simeq w^2 - 2w^2 \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{22} + 2w^2 \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{22} + w^2 \sum_{k \neq i} [(\mathbb{K}_{ik})_{22}]^2 \\
&- 2w^2 \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^q (\mathbb{K}_{ik})_{22} [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{22} + w^2 \sum_{q=2}^{\infty} \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{k \neq i} (-1)^{q+p} [(\mathbb{K}_{ik})^q]_{22} [(\mathbb{K}_{ik})^p]_{22} \quad (\text{B.4})
\end{aligned}$$

Se ha de tomar el promedio de esta ecuación. Es el mismo procedimiento antes utilizado, con la sutil diferencia que en la ecuación (B.4) aparece un tensor $\tilde{\mathbb{K}}$ sin exponente, por lo que no se puede aproximar tan simplemente a un tensor \mathbb{K} . Se ha de recordar la ecuación (5.8) del cálculo de la desviación estándar de \vec{U} ; en dicha ecuación también aparece un término de este estilo, por lo que se puede rescatar el resultado que se obtuvo en dicho cálculo al momento de calcular el promedio.

De esta manera se deduce que la única diferencia para este término es que la suma en k pasa a ser una integral, se aproxima $\tilde{\mathbb{K}} \approx \mathbb{K}$, pero en vez de usar la función distribución de pares $g^{(2)}$, aparece la función *correlación* de pares $h^{(2)}$ (revisar expresión (5.14)), *i.e.*,

$$2w^2 \sum_{k \neq i} (\tilde{\mathbb{K}}_{i;k})_{22} \longrightarrow 2w^2 n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{v \geq \epsilon} (\mathbb{K}(\vec{v}))_{22} h^{(2)}(\vec{v}) d^2 v$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned}
\langle d_y^2 \rangle &= w^2 - \underbrace{2w^2 n \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{v \geq \epsilon} (\mathbb{K}(\vec{v}))_{22} h^{(2)}(\vec{v}) d^2 v}_{I_A} + \underbrace{2w^2 n \int \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q [(\mathbb{K}(\vec{v}))^q]_{22} g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v}_{I_B} \\
&+ \underbrace{w^2 n \int [(\mathbb{K}(\vec{v}))_{22}]^2 g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v}_{I_C} - \underbrace{2w^2 n \int \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}(\vec{v}))_{22} [(\mathbb{K}(\vec{v}))^q]_{22} g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v}_{I_D} \\
&+ \underbrace{w^2 n \int \left\{ \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q [(\mathbb{K}(\vec{v}))^q]_{22} \right\}^2 g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v}_{I_E} \quad (\text{B.5})
\end{aligned}$$

Se necesita conocer $(\mathbb{K})_{22}$. Como

$$\mathbb{K}(\vec{v}) = \frac{a^2}{v^4} [\mathbb{I}v^2 - 2\vec{v}\vec{v}],$$

en coordenadas cartesianas

$$(\mathbb{K}(\vec{v}))_{22} = \frac{a^2}{(v_x^2 + v_y^2)^2} [v_x^2 - v_y^2]$$

y en coordenadas cilíndricas

$$(\mathbb{K}(\vec{v}))_{22} = \frac{a^2}{v^2} \cos(2\gamma) \quad (\text{B.6})$$

Teniendo este resultado se procede a calcular cada término por separado.

$I_A]$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{v \geq \epsilon} (\mathbb{K}(\vec{v}))_{22} h^{(2)}(\vec{v}) d^2v \quad (\text{B.7})$$

Esta integral se anula, pues dado que $h^{(2)}(\vec{v})$ en realidad no depende del ángulo en la aproximación usada, y al integrar en γ da cero.

$I_B]$

Se ha de utilizar el resultado (5.43) para la suma de manera de poder calcular esta integral.

$$\begin{aligned} 2w^2n \int \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q [(\mathbb{K}(\vec{v}))^q]_{22} g^{(2)}(\vec{v}) d^2v &= 2w^2n \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \frac{\mathbb{I}_{22}}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} v dv d\gamma \\ &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{se anula al integrar en } \gamma} \\ &= 2w^2n \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \frac{(\mathbb{K}(\vec{v}))_{22}}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} v dv d\gamma \\ &= 2w^2n 2\pi \int_{2a}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} v dv = \Phi \ln\left(\frac{5}{3}\right) w^2 \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$I_C]$

$$\begin{aligned} w^2n \int [(\mathbb{K}(\vec{v}))_{22}]^2 g^{(2)}(\vec{v}) d^2v &= w^2n \int_{2a}^{\infty} \frac{a^4}{v^4} v dv \int_0^{2\pi} \cos^2(2\gamma) d\gamma \\ &= \frac{\Phi}{8} w^2 \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

$I_D]$

$$\begin{aligned} &-2w^2n \int \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q (\mathbb{K}(\vec{v}))_{22} [(\mathbb{K}(\vec{v}))^q]_{22} g^{(2)}(\vec{v}) d^2v \\ &= -2w^2n \int_0^{2\pi} \int_{2a}^{\infty} \frac{a^2}{v^2} \cos(2\gamma) \left\{ \frac{\overbrace{\mathbb{I}_{22}}^{\text{se anula}}}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} - \frac{\frac{a^2}{v^2} \cos(2\gamma)}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} \right\} v dv d\gamma \\ &= \Phi \left[\frac{1}{2} \ln\left(\frac{5}{3}\right) - \frac{1}{4} \right] w^2 \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

$I_E]$

$$\begin{aligned}
& w^2 n \int \left\{ \sum_{q=2}^{\infty} (-1)^q [(\mathbb{K}(\vec{v}))^q]_{22} \right\}^2 g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v \\
&= w^2 n \int \left(\frac{\mathbb{I}_{22}}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} - \frac{(\mathbb{K}(\vec{v}))_{22}}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} \right)^2 g^{(2)}(\vec{v}) d^2 v \\
&= w^2 n \int \left(\frac{1}{\left(\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1\right)^2} - 2 \frac{\overbrace{(\mathbb{K}(\vec{v}))_{22}}^{\text{se anula}}}{\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1} + \frac{[(\mathbb{K}(\vec{v}))_{22}]^2}{\left(\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1\right)^2} \right) g^{(2)}(\vec{v}) v dv d\gamma \\
&= w^2 n 2\pi \int_{2a}^{\infty} \frac{1}{\left(\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1\right)^2} v dv + w^2 n \int_{2a}^{\infty} \frac{a^4}{v^4} \frac{1}{\left(\left(\frac{v}{a}\right)^4 - 1\right)^2} v dv \int_0^{2\pi} \cos^2(2\gamma) d\gamma \\
&= \Phi \left[\frac{13}{40} - \frac{5}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] w^2 \tag{B.11}
\end{aligned}$$

Reuniendo los resultados (B.7), (B.8), (B.9), (B.10) y (B.11) se obtiene

$$\langle d_y^2 \rangle = w^2 + \Phi \left[\frac{1}{5} + \frac{7}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] w^2 \tag{B.12}$$

Es necesario calcular $\langle d_y \rangle$. Si se promedia la ecuación (B.3) y se calculan las integrales involucradas se obtiene

$$\langle d_y \rangle = w + \frac{\Phi}{2} \ln(5/3) w \tag{B.13}$$

resultado que se puede obtener también usando la propiedad $\langle d_y \rangle = \langle \vec{d} \rangle_y$. El resultado (B.13) se puede entender también pensando en que, ya que se cumple que $\langle d_x \rangle = 0$, entonces las fluctuaciones del vector dipolar han de surgir por las fluctuaciones en la otra componente.

Ya es posible calcular la desviación estándar.

$$\begin{aligned}
\sigma(d_y) &= \sqrt{\langle d_y^2 \rangle - \langle d_y \rangle^2} = \sqrt{w^2 + \Phi \left[\frac{1}{5} + \frac{7}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right] w^2 - w^2 - \Phi \ln\left(\frac{5}{3}\right) w^2 + O(\Phi^2)} \\
&= \sqrt{\Phi \left[\frac{1}{5} - \frac{1}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right]} \|\vec{w}\| \\
\therefore \sigma(U_y) &= 2 \sqrt{\Phi \left[\frac{1}{5} - \frac{1}{8} \ln\left(\frac{5}{3}\right) \right]} \|\vec{w}\| = 0,73796150856058 \sqrt{\Phi} \|\vec{w}\| \approx 0,738 \sqrt{\Phi} w \tag{B.14}
\end{aligned}$$

Como se puede apreciar, el resultado (B.14) es muy similar al obtenido en (5.53).

Apéndice C

Posters

1. Título : *Stokesian forces on confined suspensions: self-consistent quadrupolar approximation* (segunda versión)
Autores : Francisco Mena, Rodrigo Soto.
Presentado en: Frontiers in Materials Research IV, CIMAT.
Reñaca, Chile, 20-24 Mayo de 2005.
Ver página 112.
2. Título : *Stokesian forces on confined suspensions: self-consistent quadrupolar approximation*. (primera versión)
Autores : Francisco Mena, Alejandra Álvarez, María Luisa Cordero, Rodrigo Soto.
Presentado en:
 - Pan-American Advanced Studies Institute (PASI) on Interfacial Fluid Dynamics: From Theory to Applications
Mar del Plata, Argentina, 6-17 Agosto de 2007
 - 2nd Warsaw School of Statistical Physics
Kasimierz Dolny, Polonia, 15-22 Junio de 2007Ver página 113.



Stokesian forces on confined suspensions: self-consistent quadrupolar approximation

F. Mena, R. Soto

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile.
http://www.dfi.uchile.cl/~rsoto

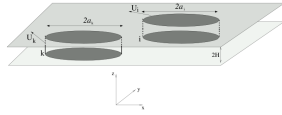


Buoyant suspensions, confined in a quasi two-dimensional geometry, are studied using the Hele-shaw model. In the far field regime, boundary integral methods are used for computing the pressure field. Using a quadrupolar approximation, the hydrodynamic forces acting on the particles are calculated. The result is a self-consistent set of equations that include the effect of particle correlations, the medium and container walls. The simple case of an homogeneous settling suspension is analyzed, showing that both the average falling velocity and its fluctuations depend on the pair distribution function, but are independent of the system size and shape. Thus, by using a Statistical Mechanics approach, a model for the pair correlation function is proposed.

The system

We consider a confined Q2D suspension, composed of N solid particles that move through an incompressible Newtonian fluid of shear viscosity η . The fluid is confined between two parallel plates separated at a distance $2H$ in the z direction.

To study the far field interactions we consider for particles thin cylinders of height L (slightly smaller than $2H$), radii a_i ($2H \ll a_i$) and mass m that have translational motion in the plane.



If the particles have more inertia than the fluid, then the later can be described by the Stokes equations. Adding the consideration of thin particles, the equations reduce to the Hele-Shaw model.

$$\vec{v}(x, y, z) = \left(1 - \frac{z^2}{H^2}\right) \vec{v}_{//}(x, y) \quad (1)$$

$$\vec{v}_{//}(x, y) = -\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{//} P \quad (2)$$

$$\nabla_{//}^2 P = 0 \quad (3)$$

The Laplace equation for P must be supplemented with the appropriate boundary conditions on the surface of each particle:

$$-\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{//} P \cdot \hat{n} = \vec{U}_i \cdot \hat{n} \quad (4)$$

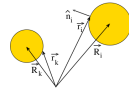
Quadrupolar expansion

Equations (3) and (4) admit a solution in terms of boundary integrals

$$P(\vec{r}) = -\sum_{i=1}^N a_i \int_0^{2\pi} \omega_i(\phi_i) \ln(|\vec{r} - \vec{r}_i|) d\phi_i \quad (5)$$

where the boundary densities satisfy

$$\omega_i(\phi_i) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \omega_k(\phi_k) \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_k) \cdot \hat{n}_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|^2} d\phi_k + \frac{2\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \cdot \hat{n}_i \quad (6)$$



Expanding ω in Fourier series, it can be shown that the monopole term vanishes. Keeping up to quadrupolar terms ($n = 2$)

$$\omega_i(\phi) = \frac{2\eta}{\pi H^2} (\vec{d}_i \cdot \hat{n}_i + 2\hat{n}_i \cdot \mathbf{Q}_i \cdot \hat{n}_i) \quad (7)$$

Substituting (7) in (6) and projecting over Fourier space we obtain the following set of self-consistent equations

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbf{K}(\vec{R}_{ik}) \vec{d}_k + \mathbf{L}(\vec{R}_{ik}) \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i \quad (8)$$

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbf{M}(\vec{R}_{ik}) \vec{d}_k + \mathbf{N}(\vec{R}_{ik}) \mathbf{Q}_k) \quad (9)$$

where $\vec{R}_{ik} = \vec{R}_i - \vec{R}_k$, and

$$\mathbf{K}_{\mu\nu}(\vec{R}) = \frac{a_i^2}{R^2} \{\delta_{\mu\nu} - 2\hat{R}_\mu \hat{R}_\nu\}$$

With similar, more complex, and faster decaying expressions for the other tensors.

Particle dynamics

The quadrupolar expression for ω is substituted in (5) to obtain the pressure and the velocity fields.

With the pressure and velocity fields the hydrodynamic forces over the particles are computed.

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} \left[\vec{d}_i^{\text{self-drag}} + \sum_{k \neq i} (\underbrace{\mathbf{K}(\vec{R}_{ik}) \vec{d}_k + \mathbf{L}(\vec{R}_{ik}) \mathbf{Q}_k}_{\text{interactions}}) \right]$$

where $m_f = \rho_f \pi a_i^2 L$ and $\tau_f = 2\eta/\rho_f H^2$ are the displaced mass and the typical relaxation time of the fluid, respectively.

Note that (8) allows to write

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} [2\vec{d}_i - \vec{U}_i] \quad (10)$$

that together with (8) and (9) constitute the dynamical equations for the particles.

Homogenous sedimentation

Consider a homogeneous suspension of identical particles of radius a that sediment due to an external force $m\vec{g}$. The total force over each particle is

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} [2\vec{d}_i - \vec{U}_i] + m\vec{g}$$

When the particles reach the terminal velocity, the force vanishes. Therefore

$$\vec{U}_i = 2\vec{d}_i - \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$$

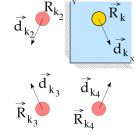
that substituted in (8) gives a closed system of equations for \vec{d}_i and \mathbf{Q}_i to solve. Then, the average sedimenting velocity is obtained to the lowest order in particle area fraction $\Phi = N\pi a^2/A$.

$$\langle \vec{U} \rangle = \left[1 + 2n \int \mathbf{S}(\vec{R}) g(\vec{R}) d^2 R \right] \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$$

with \mathbf{S} a complex tensor, $n = N/A$ the particle density and $g(\vec{R})$ the pair distribution function. If the pair correlations were neglected (i.e. $g(\vec{R}) = 1$), the sedimenting velocity would be infinite!

Method of Images

To explicitly consider the effect of the container walls, the classical method of images of electrostatics is applied. The approximation of considering only the dipole contribution of the images allows to recover the main effect.



$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\underbrace{\mathbf{K}_{ik} \vec{d}_k + \mathbf{L}_{ik} \mathbf{Q}_k}_{\text{images}}) + \vec{U}_i + \tilde{\mathbf{A}}_i \vec{d}_i \quad (11)$$

Where $\tilde{\mathbf{K}}_{ik}$ and $\tilde{\mathbf{A}}_i$ are new tensors in which all the information of the container walls is incorporated. By replacing (8) with (11), one obtains now a self-consistent model with which is possible to calculate avoiding the divergences.

Terminal Velocity and its Standard Deviation

For dilute suspensions far from the walls and considering only excluded volume effects, the results up to $O(\Phi)$ are

$$\langle \vec{U} \rangle = \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} (1 + 0.378\Phi)$$

$$\sigma(U_x) = 0.714 \sqrt{\Phi} \frac{m}{m_f} \tau_f g$$

$$\sigma(U_y) = 0.720 \sqrt{\Phi} \frac{m}{m_f} \tau_f g$$

Particle Distribution Function

The corresponding YBG equation of Statistical Mechanics is derived for the distribution of pair of particles $\tilde{f}_{1,2}$ in terms of the trio $\tilde{f}_{1,2,3}$.

$$\vec{\nabla}_{R_{12}} \tilde{f}_{12} + \vec{\nabla}_{R_{12}} \cdot (\tilde{\mathbf{T}}(\vec{x}_{12}) \tilde{f}_{12}) = -\vec{\nabla}_{R_{12}} \cdot \int \tilde{\mathbf{T}}(\vec{R}_{13}) \tilde{f}_{1,2,3} d^2 R_3 \quad (12)$$

From (12) the equation for the pair distribution function g is obtained, approximating $\tilde{f}_{1,2,3}$ only to excluded volume effects. In the infinitely dilute suspension limit, an analytic calculation gives

$$g(\mathbf{R}) = \begin{cases} 1 - \frac{\Phi}{R^2} & R > 2a \\ 0 & R < 2a \end{cases} \quad (13)$$

The new value of the terminal velocity calculated with (13) is

$$\langle \vec{U} \rangle = \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} (1 + 0.336\Phi)$$



Stokesian forces on confined suspensions: self-consistent quadrupolar approximation

F. Mena, A. Alvarez, M.L. Cordero, R. Soto

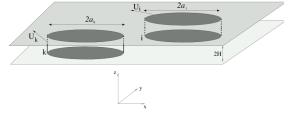
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas,
Universidad de Chile, Santiago, Chile.
http://www.dfi.uchile.cl/~rsoto

Buoyant suspensions, confined in a quasi by-dimensional geometry, are studied in the Stokes regime. In the far field regime the Stokes equations simplify to the Hele-shaw approximation, allowing the use of boundary integral methods for computing the pressure field. Using a quadrupolar approximation the hydrodynamic forces acting on the particles are calculated. The result is a self-consistent set of equations that include the effect of the medium and the particle correlations. The simple case of an homogeneous sedimenting suspension is analyzed, showing that the average falling velocity depends non trivially on density and on the particle correlations.

The system

We consider a confined Q2D suspension, composed of N solid particles that move through an incompressible Newtonian fluid of shear viscosity η . The fluid is confined between two parallel plates separated at a distance $2H$ in the z direction, being infinite in the other two directions.

To study the far field interactions we consider for particles thin cylinders of height L (slightly smaller than $2H$), radii a_i ($2H \ll a_i$) and mass m that have translational motion in the plane.



If the particles are denser than the fluid (particles have more inertia than the fluid), then the fluid can be described by the Stokes equations

$$-\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{v} = 0$$

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

Since the particles are thin, the equations reduce to the Hele-Shaw model.

$$\vec{v}(x, y, z) = \left(1 - \frac{z^2}{H^2}\right) \vec{v}_{||}(x, y) \quad (1)$$

$$\vec{v}_{||}(x, y) = -\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{||} p \quad (2)$$

$$\nabla_{||}^2 p = 0 \quad (3)$$

Note that, the above model is also valid for spherical particles in the far field regime.

The Laplace equation for P must be supplemented with the appropriate boundary conditions on the surface of each particle:

$$-\frac{H^2}{2\eta} \nabla_{||} p \cdot \hat{n} = \vec{U}_i \cdot \hat{n} \quad (4)$$

Quadrupolar expansion

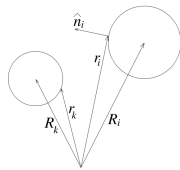
Equations (3) and (4) admit a solution in terms of boundary integrals

$$p(\vec{r}) = -\sum_{i=1}^N a_i \int_0^{2\pi} \omega_i(\phi_i) \ln(|\vec{r} - \vec{r}_i|) d\phi_i \quad (5)$$

where the boundary densities satisfy

$$\omega_i(\phi_i) = -\frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^N a_k \int_0^{2\pi} \omega_k(\phi_k) \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_k) \cdot \hat{n}_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|^2} d\phi_k$$

$$+ \frac{2\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \cdot \hat{n}_i, \quad (6)$$



Expanding ω in Fourier series, it can be shown that the monopole term vanishes.

$$\omega_i(\phi) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^i \cos(n\phi) + \beta_n^i \sin(n\phi)$$

If interactions were neglected in Eq. (6) then $\omega_i(\phi_i) = \frac{2\eta}{\pi H^2} \vec{U}_i \cdot \hat{n}_i$. This suggests to interpret the dipolar term (α_1, β_1) as a renormalized velocity. Keeping up to quadrupolar terms ($n=2$)

$$\omega_i(\phi) = \frac{2\eta}{\pi H^2} (\vec{d}_i \cdot \hat{n}_i + 2\hat{n}_i \cdot \mathbf{Q}_i \cdot \hat{n}_i) \quad (7)$$

Substituting (7) in (6) and projecting over Fourier space we obtain the following set of self-consistent equations

$$\vec{d}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbf{K}(\vec{R}_{ik}) \vec{d}_k + \mathbf{L}(\vec{R}_{ik}) \mathbf{Q}_k) + \vec{U}_i \quad (8)$$

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbf{M}(\vec{R}_{ik}) \vec{d}_k + \mathbf{N}(\vec{R}_{ik}) \mathbf{Q}_k) \quad (9)$$

where $\vec{R}_{ik} = \vec{R}_i - \vec{R}_k$, and the coupling tensors are

$$\mathbf{K}_{\mu\nu}(\vec{R}) = \frac{a_k^2}{R^2} \{\delta_{\mu\nu} - 2\hat{R}_\mu \hat{R}_\nu\}$$

$$\mathbf{L}_{\mu\nu\rho}(\vec{R}) = \frac{a_k^3}{R^3} \{\hat{R}_\mu \delta_{\nu\rho} + \hat{R}_\nu \delta_{\mu\rho} + \hat{R}_\rho \delta_{\mu\nu} - 4\hat{R}_\mu \hat{R}_\nu \hat{R}_\rho\}$$

$$\mathbf{M}_{\mu\nu\rho}(\vec{R}) = \frac{a_i a_k^2}{R^3} \{\hat{R}_\mu \delta_{\nu\rho} + \hat{R}_\nu \delta_{\mu\rho} + \hat{R}_\rho \delta_{\mu\nu} - 4\hat{R}_\mu \hat{R}_\nu \hat{R}_\rho\}$$

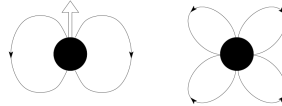
$$\mathbf{N}_{\mu\nu\rho\sigma}(\vec{R}) = \frac{a_i a_k^3}{R^4} \{12\hat{R}_\mu \hat{R}_\nu \hat{R}_\rho \hat{R}_\sigma - 3\delta_{\mu\nu} \hat{R}_\rho \hat{R}_\sigma$$

$$- \frac{3}{2} [(\delta_{\mu\rho} \hat{R}_\nu + \delta_{\nu\rho} \hat{R}_\mu) \hat{R}_\sigma + (\delta_{\mu\sigma} \hat{R}_\nu + \delta_{\nu\sigma} \hat{R}_\mu) \hat{R}_\rho]\}$$

Note that $\mathbf{M} = \mathbf{L}$ if $a_i = a$.

Particle dynamics

The quadrupolar expression for ω is substituted in (5) to obtain the pressure and the velocity fields.



With the pressure and velocity fields the hydrodynamic forces over the particles are computed. The Reynolds stress contribution vanishes and the pressure contribution is

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} \left[\vec{d}_i^{\text{self-drag}} + \sum_{k \neq i} (\mathbf{K}(\vec{R}_{ik}) \vec{d}_k + \mathbf{L}(\vec{R}_{ik}) \mathbf{Q}_k) \right]$$

where $m_f = \rho_f \pi a_i^2 L$ and $\tau_f = 2\eta/\rho H^2$ are the displaced mass and the typical relaxation time of the fluid, respectively.

Note that (8) allows to write

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} [2\vec{d}_i - \vec{U}_i] \quad (10)$$

that together with (8) and (9) constitute the dynamical equations for the particles.

Homogeneous sedimentation

Consider a homogeneous suspension of identical particles of radius a that sediment due to an external force $m\vec{g}$. The total force over each particle is

$$\vec{F}_i = -\frac{m_f}{\tau_f} [2\vec{d}_i - \vec{U}_i] + m\vec{g}$$

When the particles reach the terminal velocity, the forces vanish. Therefore

$$\vec{U}_i = 2\vec{d}_i - \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$$

that substituted in (8) gives a closed system of equations for \vec{d}_i and \mathbf{Q}_i

$$\vec{d}_i = -\sum_{k \neq i} (\mathbf{K}(\vec{R}_{ik}) \vec{d}_k + \mathbf{L}(\vec{R}_{ik}) \mathbf{Q}_k) + \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$$

$$\mathbf{Q}_i = \sum_{k \neq i} (\mathbf{L}(\vec{R}_{ik}) \vec{d}_k + \mathbf{N}(\vec{R}_{ik}) \mathbf{Q}_k) \quad (9)$$

indicating that the sedimenting velocities have N -body effects.

To acquire some intuition of the implications of the above equations, we proceed by solving them iteratively by the Born method. To the lowest order in particle area fraction $\Phi = N\pi a^2/A$

$$\vec{d}_i = \left[1 + \sum_{k \neq i} \mathbf{T}(\vec{R}_{ik})\right] \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$$

and

$$\vec{U}_i = \left[1 + 2 \sum_{k \neq i} \mathbf{T}(\vec{R}_{ik})\right] \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$$

where \mathbf{T} is a complex expression in terms of the coupling tensors. If only the dipolar contribution were kept

$$\mathbf{T}(\vec{R}) = \mathbf{K}^2 + \mathbf{K}^4 + \mathbf{K}^6 + \dots = \frac{1}{(R/a)^4 - 1}$$

Considering that the particles are statistically distributed, the average sedimenting velocity is

$$\langle \vec{U} \rangle = \left[1 + 2n \int d^2R \mathbf{T}(\vec{R}) g(\vec{R})\right] \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$$

where $n = N/A$ is the particle density and $g(\vec{R})$ is the pair distribution function.

Note that if the pair correlations were neglected (i.e. $g(\vec{R}) = 1$), the sedimenting velocity would be infinite!. Considering only excluded volume and the dipolar model

$$\langle \vec{U} \rangle = \left[1 + 4\pi n \int_{2a}^{\infty} dR \frac{R}{(R/a)^4 - 1}\right] \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g}$$

$$\langle \vec{U} \rangle = [1 + \Phi \log(5/3)] \frac{m}{m_f} \tau_f \vec{g} \quad (11)$$

References

- [1] Alejandra Alvarez and Rodrigo Soto, *Dynamics of a suspension confined in a thin cell*. Phys. of Fluids **17** 093103 (2005).

Bibliografía

- [1] Álvarez, A.: 2005, '*Dinamica de particulas en un medio fluido*'. Ph.D. thesis, Universidad de Chile.
- [2] Álvarez, A. and R. Soto: 2005, 'Dynamics of a suspension confined in a thin cell'. *Physics of Fluids* **17**, 093103.
- [3] Batchelor, G.: 1991, *An Introducton to Fluid Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [4] Batchelor, G. K.: 1972, 'Sedimentation in a dilute dispersion of spheres'. *Journal of Fluid Mechanics* **52**, 245–268.
- [5] Beenakker, C. and P. Mazur: 1983, 'Diffusion of spheres in a a concentrated suspension: Resummation of many-body hydrodynamic interactions'. *Physica* **98A**, 22–24.
- [6] Beenakker, C. and P. Mazur: 1984, 'Diffusion of spheres in a a concentrated suspension II'. *Physica* **126A**, 349–370.
- [7] Beenakker, C. and P. Mazur: 1985a, 'Is sedimentation container shape dependent?'. *Physics of Fluids* **28**, 3203–3206.
- [8] Beenakker, C. and P. Mazur: 1985b, 'On the Smoluchowski paradox in a sedimenting suspension'. *Physics of Fluids* **28**, 767–769.
- [9] Bergougnoux, L., S. Ghicini, E. Guazzelli, and J. Hinch: 2003, 'Spreading fronts and fluctuations in sedimentation'. *Physics of Fluids* **15**, 1875–1887.
- [10] Brenner, M. P. and P. J. Mucha: 2001, 'That sinking feeling'. *Nature* **409**, 568–571.
- [11] Caflish, R. E. and J. H. Luke: 1985, 'Variance in the sedimentation speed of a suspension'. *Physics of Fluids* **28**, 759–760.
- [12] Columbia University Press: 2008, *Columbia Electronic Enciclopedia*. <http://www.reference.com/browse/columbia>.
- [13] Cui, B., H. Diamant, B. Lin, and S. A. Rice: 2004, 'Anomalous Hydrodynamic Interaction in a Quasi-Two-Dimensional Suspension'. *Physical Review Letters* **92**, 258301.
- [14] Gómez, D. C., L. Bergougnoux, E. Guazzelli, and J. Hinch: 2008, 'Spreading fronts in sedimentation of dilute suspension of spheres'. *Physics of Fluids* **20**, 1875–1887.

- [15] Gómez, D. C., L. Bergougnoux, J. Hinch, and Élisabeth Guazzelli: 2007, ‘On stratification control of the velocity fluctuations in sedimentation’. *Physics of Fluids* **19**, 098102.
- [16] Guazzelli, E.: 2006, ‘Sedimentation of small particles: how can such a simple problem be so difficult?’. *C.R. Mecanique* **334**, 539–544.
- [17] Hansen, J. P. and I. R. McDonald: 1991, *Theory of Simple Liquids*. San Diego, CA: Academic Press, Inc.
- [18] Hinch, E. J.: 1988, ‘Sedimentation of small particles’. In: E. Guyon, J.-P. Nadal, and Y. Pomeau (eds.): *Disorder and Mixing*. Dordrecht, p. 153.
- [19] Koch, D. L. and E. S. G. Shaqfeh: 1991, ‘Screening in sedimenting suspensions’. *Journal of Fluid Mechanics* **224**, 275–303.
- [20] Kuusela, E.: 2005, ‘Steady-state sedimentation of non-brownian particles with finite reynolds number’. Ph.D. thesis, Helsinki University of Technology.
- [21] Ladd, A. J. C.: 1996, ‘Hydrodynamic Screening in Sedimenting Suspensions of non-Brownian Spheres’. *Physical Review Letters* **76**, 1392–1395.
- [22] Ladd, A. J. C.: 1997, ‘Sedimentation of homogeneous suspensions of non-Brownian spheres’. *Physics of Fluids* **9**, 491–499.
- [23] Ladd, A. J. C.: 2002, ‘Effects of Container Walls on the Velocity Fluctuations of Sedimenting Spheres’. *Physical Review Letters* **88**, 048301.
- [24] Landau, L. D. and E. M. Lifshitz: 1991, *Mecánica de Fluidos*. Barcelona: Editorial Reverté.
- [25] Lei, X., B. J. Ackerson, and P. Tong: 2001, ‘Settling Statistics of Hard Sphere Particles’. *Physical Review Letters* **86**, 3300–3303.
- [26] Luke, J. H. C.: 1999, ‘Decay of velocity fluctuations in a stably stratified suspension’. *Physics of Fluids* **11**, 754.
- [27] Mucha, P. J. and M. P. Brenner: 2003, ‘Diffusivities and front propagation in sedimentation’. *Physics of Fluids* **15**, 1305.
- [28] Nguyen, N. Q. and A. J. C. Ladd: 2004, ‘Microstructure in a settling suspension of hard spheres’. *Physical Review E* **69**, 050401.
- [29] Nguyen, N.-Q. and A. J. C. Ladd: 2005, ‘Sedimentation of hard-sphere suspensions at low Reynolds number’. *Journal of Fluid Mechanics* **525**, 73–104.
- [30] Nicolai, H. and E. Guazzelli: 1995, ‘Effect of the vessel size on the hydrodynamic diffusion of sedimenting spheres’. *Physics of Fluids* **7**, 3–5.
- [31] Petrovsky, I. G.: 1991, *Lectures on Partial Differential Equation*. New York: Dover Publications Inc.
- [32] Segrè, P., E. Herbolzheimer, and P. M. Chaikin: 1997, ‘Long Range Correlations in Sedimentation’. *Physical Review Letters* **79**, 2574–2577.

- [33] Segrè, P., F. Liu, P. Umbanhowar, and D. A. Weitz: 2001, 'An effective gravitational temperature for sedimentation'. *Nature* **409**, 594–597.
- [34] Smoluchowski, M.: 1912, 'On the practical applicability of Stokes' law'. *Proc. 5th Int. Congr. Math.* **2**, 192–201.
- [35] Tee, S.-Y., P. Mucha, L. Cipelletti, S. Manley, M. Brenner, P. Segrè, and D. Weitz: 2002, 'Nonuniversal Velocity Fluctuations of Sedimenting Particles'. *Physical Review Letters* **89**, 054501.