

**UNIVERSITÄT
BAYREUTH**

Bachelorarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades

Bachelor of Science (B. Sc.)

Sedimentationsdynamik asymmetrischer Mikroteilchen

FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK, PHYSIK UND INFORMATIK

LEHRSTUHL THEORETISCHE PHYSIK I

vorgelegt von
Florian Sammüller

Matrikelnummer: 1348208

Kontakt: florian.sammüller@uni-bayreuth.de

Betreuer: Prof. Dr. Walter Zimmermann

Bayreuth, 6. September 2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen der Hydrodynamik	3
2.1	Hinführung und Eulergleichung	3
2.2	Erhaltungssätze	4
2.2.1	Kontinuitätsgleichung	4
2.2.2	Impulserhaltung	5
2.3	Viskose Fluide: Spannungs- und Reibungstensor	6
2.4	Navier-Stokes-Gleichung	7
2.4.1	Allgemeine Form	7
2.4.2	Anwendung: Berechnung des Poiseuille-Flusses	8
2.4.3	Entdimensionalisierung	10
2.4.4	Der Limes kleiner Reynolds-Zahlen	11
2.5	Oseen-Tensor und Mobilitätsmatrix	11
2.5.1	Herleitung	11
2.5.2	Hydrodynamische Wechselwirkung von N Teilchen	14
2.5.3	Anwendung: Sedimentation von zwei Teilchen	15
3	Grundlagen der Numerik	18
3.1	Allgemeines zu Differentialgleichungen	18
3.2	Euler-Polygonzugverfahren	19
3.3	Runge-Kutta-Verfahren	19
3.4	Genauigkeit und Stabilitätskriterien	20
4	Sedimentationsverhalten von Mikropartikeln	23
4.1	Aufbau des Programms	23
4.1.1	Grundstruktur der Simulation	23
4.1.2	Testprogramm: Sedimentation von zwei Teilchen	24
4.1.3	Erweiterung um Strömungsfeld und Wechselwirkungen	24
4.1.4	Optimierung mit Rotne-Prager-Tensor	26
4.2	Sedimentation eines deformierbaren 3-Teilchen-Modells	28
4.2.1	Homogene und symmetrische Anordnung	29

4.2.2	Variation der Massen	30
4.2.3	Variation der Form	32
4.2.4	Überblick	33
4.2.5	Quantitative Untersuchung des Sedimentationswinkels	34
4.2.6	Vergleich der Sedimentationsgeschwindigkeit	39
4.3	Sedimentation eines 4-Teilchen-Modells	40
4.3.1	Vergleich mit 3-Teilchen-Modell	40
4.3.2	Klassifikation stabiler Sedimentationsbewegungen	42
4.4	Analytische Betrachtungen für den Spezialfall starrer Körper	43
4.4.1	Herleitung stationärer Zustände	43
4.4.2	Verallgemeinerung auf inhomogene Partikel	46
4.4.3	Klassifikation stationärer Sedimentationsbewegungen	46
4.4.4	Anwendung auf Kugel-Modell	47
4.4.5	Ergebnisse und Grenzen der analytischen Betrachtung	48
5	Fazit und Ausblick	52
	Literatur	54

1 Einleitung

Die Strömungsmechanik ist als Gebiet der Physik sowohl im empirischen als auch im theoretischen Bereich interessant. Sie befasst sich mit Bewegung von Flüssigkeiten und Gasen und wird durch Bewegungsgleichungen für Felder mathematisch motiviert. Praktisch allen Problemen mit Newtonschen Flüssigkeiten liegt die berühmte Navier-Stokes-Gleichung zu Grunde. Diese partielle Differentialgleichung erlangt ihren Ruhm auch dadurch, dass für viele Fälle, insbesondere für die Turbulenz, keine analytischen Lösungen bekannt sind. Sogar eines der sieben Millenniumprobleme befasst sich mit der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen dieses Rand- und Anfangswertproblems [1]. Trotzdem kann durch die stetig wachsende Rechenleistung moderner Computer diese Gleichung als Ausgangspunkt vieler numerischer Methoden zur Erforschung von Fluiden verstanden werden [2].

Eine besondere Einschränkung, die auch in dieser Arbeit Anwendung findet, ist der Limes kleiner Reynolds-Zahlen. Dadurch vereinfacht sich die Navier-Stokes-Gleichung, da sämtliche Trägheitseffekte vernachlässigt werden können. Natürlich ist diese Näherung nicht immer zulässig. Doch bei der Betrachtung kleiner Partikel, deren Bewegung ausschließlich durch das sie umgebende Strömungsfeld und angreifende Kräfte verursacht wird, hilft diese Maßnahme sowohl der analytischen als auch der numerischen Beschreibung. Wegen der praktischen Eingrenzung auf kleine Partikel wird dieses Regime auch Mikrofluidik genannt [2].

Zu unterscheiden ist dabei zwischen passiven und aktiven Teilchen. Während die Bewegung der erstgenannten vollständig durch das sie umgebende Medium bestimmt ist, können letztere selbst eine Kraft auf die Flüssigkeit ausüben, und sich so potentiell fortbewegen. Viele Anwendungen dazu liefert die Natur in Form von Mikroorganismen mit beweglichen Beinchen oder Fühlern, welche die koordinierte translatorische Bewegung dieser Lebewesen verursachen. Auch das Vorkommen passiver Teilchen wie beispielsweise Mikroplastik ist besonders in der Meeresforschung bekannt; nicht zuletzt da sie ein ernstzunehmendes Umweltproblem darstellen [3].

Durch immer weiter fortschreitende Simulationsmethoden können gerade diese Prozesse in der theoretischen Physik sehr detailgetreu modelliert werden. In der aktuellen Forschung der letzten Jahre erlebt dieser Bereich deshalb einen enormen Interessenzuwachs [4], wobei oft auf den etlichen analytischen Ergebnisse des letzten Jahrhunderts aufge-

1 Einleitung

baut wird [5].

Auch in dieser Arbeit soll das Verhalten von Mikropartikeln sowohl numerisch als auch analytisch untersucht werden. Mit der Berufung auf die Grundlagenforschung liegt hierbei ein besonderes Augenmerk auf der Simulation passiver Teilchenkollektive, die durch ein möglichst einfaches Modell beschrieben werden. Von Interesse ist dann die Untersuchung der Sedimentationsbewegung unter der Einwirkung einer externen Gravitationskraft. Insbesondere wird in Kapitel 4 darauf eingegangen, wie sich Inhomogenitäten und Asymmetrien des Partikels auf dessen Sedimentationsbewegung auswirken. Zuvor wird in Kapitel 2 eine theoretische Hinführung zur Strömungsmechanik gegeben, wobei sich im weiteren Verlauf insbesondere auf die Mikrofluidik spezialisiert wird. Ebenfalls werden wichtige Hintergründe zu verwendeten numerischen Verfahren in Kapitel 3 präsentiert und deren Vor- und Nachteile aufgezeigt. Damit können dann explizit gegebene Teilchenkollektive simuliert, und die gewonnenen Ergebnisse ausgewertet und diskutiert werden. Zuletzt wird in Kapitel 4.4 erläutert, wie sich manche Bewegungsmuster auch analytisch erklären lassen, und unter welchen Bedingungen sich eine numerische Berechnung der Bewegungsgleichungen vermeiden lässt.

2 Grundlagen der Hydrodynamik

Bei der Beschreibung von Fluiden bewegt man sich thematisch im Bereich der Hydrodynamik. Dabei gelten in dieser Arbeit die Gesetze der nichtrelativistischen, klassischen Physik. Die Modellierung von Flüssigkeiten erfolgt allerdings nicht als Vielteilchenmodell, sondern im Rahmen der sogenannten *Kontinuumshypothese* mithilfe von Feldern, die zum Beispiel die Dichte- oder Geschwindigkeitsverteilung angeben. Lokale molekulare oder atomistische Effekte werden also vernachlässigt, was auch in der Größenordnung von Mikroschwimmern noch hinreichend ist. Ziel dieses Abschnittes ist es nun, entsprechende Gleichungen zur Beschreibung dieser Felder herzuleiten und deren physikalische Konsequenzen zu erläutern.

2.1 Hinführung und Eulergleichung

Zunächst wird das Geschwindigkeitsfeld $\vec{u}(\vec{r}(t), t)$ des Fluids betrachtet. Rein mathematisch ergibt sich durch Ausführen der totalen Ableitung auf die Geschwindigkeit die Gleichung

$$\frac{d}{dt} \vec{u}(\vec{r}(t), t) = \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \vec{u}}{\partial r_i} \frac{dr_i}{dt} = \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u}. \quad (2.1)$$

Diese eigentlich triviale Identität wird auch als *Reisegleichung* bezeichnet, da man durch das Bilden der sogenannten *substantiellen* Ableitung der Trajektorie eines Fluidelements folgt, was der sogenannten Eulerschen Betrachtungsweise entspricht [6]. Gerade der letzte nichtlineare Summand ist in der Fluidodynamik für interessante Effekte verantwortlich, da er zum Beispiel bei der Konvektion eine wichtige Rolle spielt.

Weiterhin ist der bekannte Zusammenhang zwischen dem Druck p und der dadurch ausgeübten Kraft [7]

$$\vec{F} = - \oint_{\partial V} p d\vec{A} \stackrel{\text{Gauß}}{=} - \int_V (\nabla p) dV. \quad (2.2)$$

bekannt. Dabei ist das Vorzeichen in der entgegengesetzten Richtung der Kraft \vec{F} zum Normalenvektor des Flächenelements $d\vec{A}$ begründet. Im zweiten Schritt wurde außerdem der Satz von Gauß angewendet. Weiterhin kann das zweite Newtonsche Axiom

2 Grundlagen der Hydrodynamik

miteinbezogen werden. Differentiell formuliert gilt dann

$$d\vec{F} = -\nabla p dV = \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} dm. \quad (2.3)$$

Durch Umstellen und Einsetzen von Gleichung (2.1) erhält man schließlich die sogenannte *Eulergleichung*

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} = -\nabla p \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad (2.4)$$

mit der Dichte ρ der Flüssigkeit. Falls eine externe Kraft an die Flüssigkeit angreift, so muss diese natürlich ergänzt werden. Analog zur obigen Herleitung ergibt sich beispielsweise im Schwerfeld mit der Erdbeschleunigung \vec{g} die Gleichung

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \vec{g}. \quad (2.5)$$

Man beachte, dass die Eulergleichung nur für ideale Fluide gilt [7]. In diesen gibt es keine Dissipationseffekte durch Reibung, was für die folgenden Überlegungen nützlich ist. Auf das Verhalten von Flüssigkeiten mit innerer Reibung wird in Kapitel 2.3 eingegangen.

2.2 Erhaltungssätze

Neben dieser „Bewegungsgleichung“ stellen sich wie in vielen Feldtheorien Erhaltungssätze als besonders hilfreich heraus. Zunächst kann der Massenstrom eines Fluides betrachtet werden [7].

2.2.1 Kontinuitätsgleichung

Dazu wird zuerst die Massenstromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \vec{u}(\vec{r}, t) \quad (2.6)$$

eingeführt. Mit dieser lässt sich durch Integration über die Oberfläche ∂V eines fest gewählten Volumens V feststellen, dass sich die Masse M in diesem Volumen pro Einheitszeit gemäß

$$\dot{M} = - \oint_{\partial V} \vec{j} \cdot d\vec{A} \stackrel{\text{Gauß}}{=} - \int_V \nabla \cdot \vec{j} dV \quad (2.7)$$

ändert. Das negative Vorzeichen kann wieder dadurch erklärt werden, dass die Masse steigen muss, falls Flüssigkeit in das Volumen strömt bzw. sinkt wenn sie dieses verlässt. Dann stehen aber \vec{j} und $d\vec{A}$ jeweils antiparallel.

Andererseits kann \dot{M} auch analytisch als Ableitung mit

$$\dot{M} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \, dV = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} \, dV \quad (2.8)$$

berechnet werden. Wegen der freien Wahl des Volumens V müssen die Integranden übereinstimmen, sodass man schließlich die sogenannte *Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (2.9)$$

erhält. Anschaulich besagt dieses Gesetz, dass Anteile eines Fluids bei einem beliebigen Prozess nicht verschwinden oder entstehen können, falls keine Quelle vorhanden ist.

Allgemein beschreiben Gleichungen, die eine Größe und deren entsprechenden Fluss analog zu (2.9) verknüpfen, eine zeitliche Erhaltung dieser Flussgröße. So kommen Kontinuitätsgleichungen beispielsweise auch in der Elektrodynamik und Quantenmechanik vor [8].

Durch Einsetzen von $\vec{j} = \rho \vec{u}$ und Anwenden der Produktregel für die Divergenz erhält man weiterhin

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \vec{u} = \frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.10)$$

Damit ist ersichtlich, dass für ein inkompressibles Fluid die Bedingung

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.11)$$

gelten muss, da die Dichte dann zeitlich und räumlich konstant ist.

2.2.2 Impulserhaltung

Eine ähnliche Erhaltungsgleichung lässt sich auch für den Impuls formulieren [7]. Unter der Annahme einer inkompressiblen Flüssigkeit kann die Vektoridentität¹ $\nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) = (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u}$ in der Eulergleichung (2.5) angewandt werden. Man erhält mit einer allgemeinen Kraftdichte $\vec{f}(\vec{r}, t)$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \vec{f}. \quad (2.12)$$

Betrachtet man weiterhin die Massenstromdichte genauer, so stellt man fest, dass sie die Einheit einer Impulsdichte hat

$$d\vec{p} = \vec{u} \, dm = \vec{u} \rho \, dV \quad \Leftrightarrow \quad \vec{j} = \rho \vec{u} = \frac{dp}{dV}. \quad (2.13)$$

¹Hierbei bezeichnet \otimes das dyadische Produkt, also $(\vec{u} \otimes \vec{u})_{ij} = u_i u_j$. Somit gilt komponentenweise:
 $(\nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}))_i = \partial_{x_j} (u_i u_j) = u_j \partial_{x_j} u_i + u_i \partial_{x_j} u_j = (\vec{u} \cdot \nabla) u_i + \underbrace{(\nabla \cdot \vec{u}) u_i}_{=0}$

Hier kann nun die Impulsstromdichte

$$\mathbf{\Pi} = \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{1} = \vec{j} \otimes \vec{u} + p \mathbb{1} \quad (2.14)$$

eingeführt werden. Diese ist ein Tensor zweiter Stufe, da der Impuls vektoriell ist.² Damit folgt durch Einsetzen in (2.12) wieder eine Erhaltungsgleichung

$$\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Pi} = \vec{f}, \quad (2.15)$$

die der obigen Kontinuitätsgleichung ähnelt. Die Kraftdichte \vec{f} dient hier als „Impulsquelle“; ohne sie würden einzelne Fluidelemente nicht beschleunigt werden.

2.3 Viskose Fluide: Spannungs- und Reibungstensor

Bei den bisherigen Überlegungen ist immer wichtig, die vorausgesetzten Annahmen in Bezug auf die tatsächlichen Eigenschaften von Fluiden zu rechtfertigen. Bei der Kontinuitätsgleichung (2.9) ist die Annahme der Massenerhaltung praktisch immer erfüllt. Bei der Eulergleichung (2.5) beschränkt man sich auf ideale Fluide. Die Impulsbilanz (2.15) ist zusätzlich nur für inkompressible Flüssigkeiten gültig. Doch gerade die Vernachlässigung von Dissipationseffekten durch Wärmefluss und innere Reibung ist in realen Fluiden problematisch. Zumindest die Reibung lässt sich ausgehend von der bisher dargelegten Vorarbeit miteinbeziehen.

Dazu betrachtet man zunächst die Impulsstromdichte (2.14), die den Druck p enthält. Dabei wirkt dieser Druck auf ein beliebiges Volumenelement immer senkrecht auf dessen Grenzflächen. Gibt es wie im Folgenden zusätzliche Scherkräfte auf dieses Volumenelement, so muss man den allgemeineren Spannungstensor σ heranziehen. Um kein Drehmoment auf das Volumenelement auszuüben, muss σ symmetrisch sein, das heißt es gibt insgesamt 6 unabhängige Matrixelemente. Außerdem kann man zwischen reinen Druck- und reinen Scherkräften unterscheiden. Der Spannungstensor σ kann also in zwei Anteile

$$\sigma = p \mathbb{1} + \mathbf{R} \quad (2.16)$$

zerlegt werden [7]. Um sich der Gestalt des Reibungstensors \mathbf{R} klar zu werden, dient folgende heuristische Herleitung [9].

Man betrachte zwei gegeneinander verschiebbare Platten mit einer Flüssigkeit in deren Zwischenraum. Aus Stetigkeitsgründen haftet die Flüssigkeit an den Platten. Bewegt man eine Platte relativ zur anderen, so ist dazu eine Kraft nötig, da die viskose Flüssig-

²Analog dazu ist die Massenstromdichte ein Vektor, weil die Dichte skalar ist.

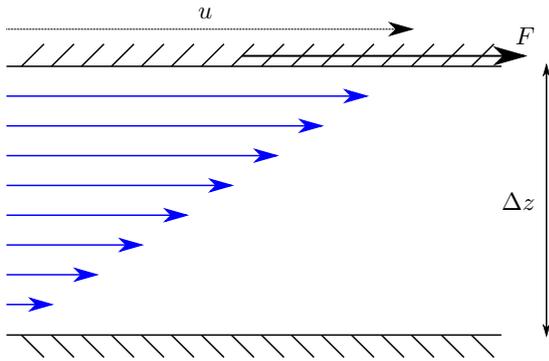


Abbildung 2.1: Zwei Platten, zwischen denen sich ein Geschwindigkeitsprofil der Flüssigkeit ausbildet. Die obere Platte bewegt sich relativ zur unteren mit der Geschwindigkeit u . Zum Verschieben ist die Kraft F notwendig.

keit einen Geschwindigkeitsgradienten aufbauen muss (vergleiche Abbildung 2.1). Dies geschieht mit einer gewissen Proportionalitätskonstante η in erster Näherung linear zu diesem und der Fläche A der Platten durch

$$F = \eta A \frac{\Delta u}{\Delta z}. \quad (2.17)$$

Allerdings ist diese Näherung nur lokal und für geringe Abstände Δz gültig. Die Ausführung dieser Grenzübergänge führt zur viskosen Schubspannung

$$R = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{dF}{dA} = \eta \frac{du}{dz}. \quad (2.18)$$

Dabei ist η eine phänomenologische Eigenschaft der Flüssigkeit, die ihre „Zähigkeit“ beschreibt und *dynamische Viskosität* genannt wird. Um dieses Ergebnis vom gewählten eindimensionalen Fall auf drei Dimensionen zu übertragen, ersetzt man die Ableitung durch den Gradienten. Allerdings muss noch die Symmetrie des Reibungstensors beachtet werden. Aus der Betrachtung einer gleichmäßig rotierenden Flüssigkeit, in der keine innere Reibung auftritt [7], erhält man

$$R_{ij} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.19)$$

2.4 Navier-Stokes-Gleichung

2.4.1 Allgemeine Form

Mit dem im vorherigen Kapitel gefundenen Reibungstensor lässt sich nun der allgemeine Impulstransport einer viskosen Flüssigkeit durch

$$\mathbf{\Pi} = \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + \boldsymbol{\sigma} = \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbf{1} + \eta \nabla \vec{u} \quad (2.20)$$

2 Grundlagen der Hydrodynamik

ausdrücken, wenn die Viskosität als räumlich konstant angenommen wird [7]. Setzt man diesen Zusammenhang in Gleichung (2.15) ein und nutzt die bekannte Identität

$$\nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) = (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + (\nabla \cdot \vec{u}) \vec{u}, \quad (2.21)$$

so folgt unter Ausnutzung von $\nabla \cdot \vec{u} = 0$

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) = -\nabla p + \eta \Delta \vec{u} + \vec{f}. \quad (2.22)$$

Dies ist die *Navier-Stokes-Gleichung* für viskose und inkompressible Fluide. Berücksichtigt man weiterhin die Kompressibilität, so ergibt sich die noch allgemeinere Form [7]

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) = -\nabla p + \eta \Delta \vec{u} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) + \vec{f}. \quad (2.23)$$

Dabei wird zusätzlich zwischen der bereits bekannten dynamischen Viskosität η und der Volumenviskosität ζ unterschieden, die aus einer komplexeren Gestalt des Reibungstensors (2.19) herrühren. Dieser muss dann mit dem allgemeinen Viskositätstensor formuliert werden, der nach Symmetrieüberlegungen und Isotropiebedingungen nur zwei unabhängige Parameter η und ζ enthält [10]. Da in dieser Arbeit jedoch ausschließlich als inkompressibel angenommene Flüssigkeiten relevant sind, genügt für die weiteren Betrachtungen die Navier-Stokes-Gleichung in der Form (2.22).

2.4.2 Anwendung: Berechnung des Poiseuille-Flusses

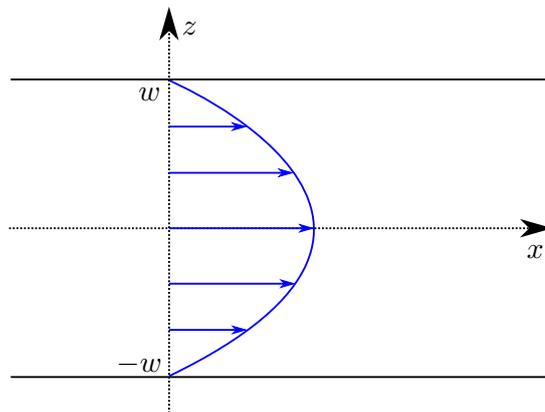


Abbildung 2.2: Skizze des Strömungsprofils zwischen zwei Platten im Abstand $2w$. Durch einen Druckgradienten in x -Richtung bildet die Flüssigkeit ein parabol-förmiges Geschwindigkeitsprofil aus.

Aussagen über die allgemeine Lösbarkeit der Navier-Stokes-Gleichung beschäftigen insbesondere die Mathematik auch noch heutzutage. So ist bisher nicht einmal bekannt, ob für alle Anfangswerte $\vec{u}(\vec{x}, 0)$ und $p(\vec{x}, 0)$ eine Lösung existiert, die bestimmte Regularitätsbedingungen erfüllen soll [1]. Dies verdeutlicht die Schwierigkeit, analytische

Antworten auf bestimmte Probleme der Kontinuumsmechanik zu erhalten. Eine der einfachsten Lösungen der Navier-Stokes-Gleichung ist der Poiseuille-Fluss, der im Folgenden hergeleitet wird [8].

Man betrachtet zwei zur x-y-Ebene parallele Platten im Abstand $2w$, deren Zwischenraum mit einer viskosen Flüssigkeit gefüllt ist. Auf diese wirkt ein konstanter Druckgradient in x-Richtung. Zunächst ist durch die Viskosität die Haftbedingung

$$\vec{u}(z = \pm w) = 0 \quad (2.24)$$

an den Wänden vorgegeben. Da sich nach gewisser Zeit ein Zustand einstellt, der sich zeitlich nicht mehr ändert, verschwindet $\partial \vec{u} / \partial t$ und es verbleibt die stationäre Navier-Stokes-Gleichung

$$\rho(\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = -\nabla p + \eta \Delta \vec{u}. \quad (2.25)$$

Aus der Symmetrie des Problems folgen für den Druck und die Geschwindigkeit

$$\nabla p = - \begin{pmatrix} p' \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u} = \begin{pmatrix} u_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Dabei hängt u_x nur von z ab, woraus sich

$$(\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \left[\begin{pmatrix} u_x(z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} u_x(z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = u_x(z) \partial_x \begin{pmatrix} u_x(z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (2.27)$$

ergibt. Somit verbleibt die relevante Komponente der Navier-Stokes-Gleichung

$$\eta \frac{d^2 u_x}{dz^2} = -p'. \quad (2.28)$$

Zweimalige Integration liefert die allgemeine Lösung

$$u_x(z) = -\frac{p'}{2\eta} z^2 + C_1 z + C_2 \quad (2.29)$$

mit den Integrationskonstanten C_1 und C_2 , die sich durch die Randbedingungen bestimmen lassen. Nach kurzer Rechnung erhält man $C_1 = 0$ und $C_2 = p'w^2/(2\eta)$ und die endgültige Lösung lautet

$$u_x(z) = \frac{p'}{2\eta} (w^2 - z^2) = u_0 \left(1 - \frac{z^2}{w^2}\right), \quad -w \leq z \leq w, \quad (2.30)$$

mit der maximalen Flussgeschwindigkeit $u_0 = p'w^2/(2\eta)$ bei $z = 0$.

2.4.3 Entdimensionalisierung

Eine Besonderheit der Navier-Stokes-Gleichung zeigt sich, wenn man sie mithilfe von entdimensionalisierten Größen beschreibt. Dazu gibt man sich die für das Problem typische Länge L und Geschwindigkeit V vor, woraus die Transformationen

$$\vec{r} = L\vec{r}', \quad \vec{u} = U\vec{u}' \quad (2.31)$$

$$\Rightarrow t = \frac{L}{U}t', \quad p = \rho U^2 p', \quad \vec{f} = \frac{\rho U^2}{L} \vec{f}', \quad \nabla = \frac{1}{L} \nabla' \quad (2.32)$$

folgen. Diese Größen lassen sich nun in die Navier-Stokes-Gleichung einsetzen und man erhält

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{U^2}{L} \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t'} + \frac{U^2}{L} (\vec{u}' \cdot \nabla') \vec{u}' \right) &= -\frac{\rho U^2}{L} \nabla' p' + \frac{\eta U}{L^2} \Delta' \vec{u}' + \frac{\rho U^2}{L} \vec{f}' \\ \Leftrightarrow \frac{\rho U^2}{L} \left(\frac{\partial \vec{u}'}{\partial t'} + (\vec{u}' \cdot \nabla') \vec{u}' \right) &= -\frac{\rho U^2}{L} \nabla' p' + \frac{\eta U}{L^2} \Delta' \vec{u}' + \frac{\rho U^2}{L} \vec{f}' \\ \Leftrightarrow \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t'} + (\vec{u}' \cdot \nabla') \vec{u}' &= -\nabla' p' + \frac{\eta}{\rho U L} \Delta' \vec{u}' + \vec{f}'. \end{aligned}$$

Hier kann nun die *Reynolds-Zahl*

$$Re = \frac{\rho U L}{\eta} \quad (2.33)$$

definiert werden, wodurch die Navier-Stokes-Gleichung die Form

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{u}'}{\partial t'} + (\vec{u}' \cdot \nabla') \vec{u}' &= -\nabla' p' + \frac{1}{Re} \Delta' \vec{u}' + \vec{f}' \\ \Leftrightarrow \frac{d\vec{u}'}{dt'} - \frac{1}{Re} \Delta' \vec{u}' &= -\nabla' p' + \vec{f}' \end{aligned} \quad (2.34)$$

erhält. Es verbleibt nur noch der einzige physikalische Parameter Re . Somit verhalten sich zwei Strömungssysteme mit gleicher Reynolds-Zahl gleich. Dies wird als dynamische Ähnlichkeit bezeichnet. Die beiden Systeme können dabei unterschiedliche Skalierung haben, das heißt eine andere typische Länge L besitzen. Die Umrechnung zwischen den restlichen Größen, sodass sich beide Systeme ähnlich sind, liefert Re . Dieses Erkenntnis wird auch genutzt, um beispielsweise in Windkanälen Strömungsversuche an miniaturisierten Modellen von Fahrzeugen oder Flugzeugen durchzuführen und davon ausgehend auf das Verhalten in der realen Größenordnung zu schließen.

Weiterhin dient die Reynolds-Zahl als Maß für ein vorherrschendes laminares ($Re \ll 1$) oder turbulentes ($Re \gg 1$) Regime. Dabei gibt sie das Verhältnis zwischen Trägheit und Reibung der Flüssigkeit an.³ Bei Systemen mit kleiner Reynolds-Zahl, die im Folgenden

³Man vergleiche dazu die jeweiligen Kräfte:

noch näher betrachtet werden, überwiegt der Reibungsanteil.

2.4.4 Der Limes kleiner Reynolds-Zahlen

Wie oben hergeleitet kann also ein dominierendes Regime durch die Reynolds-Zahl angegeben werden. Für Mikropartikel ist Re nach Definition (2.33) sehr klein. Die Trägheitseffekte der Flüssigkeit können also vernachlässigt werden. Weiterhin ist die Strömung als stationär anzunehmen; es sollen gemäß $Re \ll 1$ keine zeitlich variablen Turbulenzen auftreten. Damit vereinfacht sich die Navier-Stokes-Gleichung (2.22) zu

$$0 = -\nabla p + \eta \Delta \vec{u} + \vec{f}. \quad (2.35)$$

Man erhält die sogenannte *Stokes-Gleichung*, die im Wesentlichen die Mikrofluidik beschreibt. Sie ist also ein wichtiger Ausgangspunkt für die numerische Untersuchung von Phänomenen in diesem Bereich, insbesondere im Rahmen dieser Arbeit.

2.5 Oseen-Tensor und Mobilitätsmatrix

Mit der Stokes-Gleichung und der Bedingung für Inkompressibilität ergibt sich das System

$$-\nabla p + \eta \Delta \vec{u} + \vec{f} = 0, \quad (2.36)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.37)$$

Ziel ist es nun, eine allgemeine Lösung für dieses Randwertproblem zu finden.

2.5.1 Herleitung

Die Lösung kann beispielsweise mithilfe der Fouriertransformation hergeleitet werden. Hier sei diese durch

$$\mathcal{F}\{f\} = f(\vec{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (2.38)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{f\} = f(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k f(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2.39)$$

definiert. Folgende Herleitung richtet sich nach Lisicki [11]; insbesondere werden dort weitere Rechenwege genannt, die den Oseen-Tensor aus unterschiedlicher mathematischer bzw. physikalischer Perspektive motivieren.

$$F_T = m \cdot a \sim \rho L^3 \cdot \frac{U^2}{L} = \rho U^2 L^2 \quad \text{und} \quad F_R = \eta \cdot A \cdot \frac{\Delta u}{\Delta z} \sim \eta \cdot L^2 \cdot \frac{U}{L} = \eta U L$$

$$\Rightarrow Re = \frac{\rho U L}{\eta} = \frac{\rho U^2 L^2}{\eta U L} = \frac{F_T}{F_R}$$

2 Grundlagen der Hydrodynamik

Durch Anwendung der Fouriertransformation auf Gleichung (2.36) und (2.37) erhält man

$$\eta k^2 \vec{u}(\vec{k}) + i\vec{k}p(\vec{k}) - \vec{f}(\vec{k}) = 0, \quad (2.40)$$

$$i\vec{k} \cdot \vec{u}(\vec{k}) = 0. \quad (2.41)$$

Zusätzlich benötigt man noch eine Bestimmungsgleichung für $p(\vec{k})$. Diese kann erhalten werden, indem man die Divergenz der Stokes-Gleichung (2.36) bildet, was zu

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla \cdot \left(-\nabla p(\vec{r}) + \eta \Delta \vec{u}(\vec{r}) + \vec{f}(\vec{r}) \right) \\ &= -\Delta p(\vec{r}) + \eta \nabla \cdot (\Delta \vec{u}(\vec{r})) + \nabla \cdot \vec{f}(\vec{r}) \\ &= -\Delta p(\vec{r}) + \nabla \cdot \vec{f}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.42)$$

führt. Dabei wurde die Identität

$$\nabla \cdot (\Delta \vec{u}) = \Delta \underbrace{(\nabla \cdot \vec{u})}_{=0} \quad (2.43)$$

und Inkompressibilität ausgenutzt. Der gewonnene Ausdruck wird ebenfalls transformiert und wird zu

$$0 = k^2 p(\vec{k}) + i\vec{k} \cdot \vec{f}(\vec{k}) \quad \Rightarrow \quad p(\vec{k}) = -\frac{i\vec{k}}{k^2} \cdot \vec{f}(\vec{k}). \quad (2.44)$$

Eingesetzt in die Stokes-Gleichung im \vec{k} -Raum ergibt dies den Zusammenhang

$$\begin{aligned} \vec{u}(\vec{k}) &= \frac{1}{\eta k^2} \left(\vec{f}(\vec{k}) - i\vec{k}p(\vec{k}) \right) \\ &= \frac{1}{\eta k^2} \left(\vec{f}(\vec{k}) - \frac{\vec{k}\vec{k}}{k^2} \cdot \vec{f}(\vec{k}) \right) \\ &= \frac{1}{\eta k^2} \left(\mathbb{1} - \hat{k} \otimes \hat{k} \right) \vec{f}(\vec{k}) \end{aligned} \quad (2.45)$$

zwischen Kraftdichte und Geschwindigkeitsfeld. Dabei bezeichnet \hat{k} den Einheitsvektor in Richtung \vec{k} . Diese Gleichung muss nun noch zurück in den direkten Raum transformiert werden und man erhält

$$\begin{aligned} \vec{u}(\vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{1}{\eta k^2} \left(\mathbb{1} - \hat{k} \otimes \hat{k} \right) \vec{f}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{1}{8\pi^3 \eta k^2} \left(\mathbb{1} - \hat{k} \otimes \hat{k} \right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \vec{f}(\vec{r}') e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{1}{8\pi^3 \eta k^2} \left(\mathbb{1} - \hat{k} \otimes \hat{k} \right) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \right) \vec{f}(\vec{r}') \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \mathbf{O}(\vec{r} - \vec{r}') \vec{f}(\vec{r}'). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Die Größe $\mathbf{O}(\vec{r} - \vec{r}')$ wird als *Oseen-Tensor* bezeichnet und ist mit Gleichung (2.46) nach Definition die Greensche Funktion der Stokes-Gleichung. $\mathbf{O}(\vec{r} - \vec{r}')$ vermittelt die Geschwindigkeit der Flüssigkeit am Ort \vec{r} , wenn bei \vec{r}' eine Punktkraft wirkt. Somit quantifiziert der Oseen-Tensor die hydrodynamische Wechselwirkung zwischen mehreren Teilchen.

Man beachte, dass diese Wechselwirkung hierbei als instantan angenommen wird, denn der Oseen-Tensor ist nur von der aktuellen Position des anderen Teilchens abhängig. Im Bereich kleiner Strömungsgeschwindigkeiten weit unterhalb der Schallgeschwindigkeit des jeweiligen Fluids ist dies aber eine hinreichende Näherung.

Nun wird zur Herleitung der expliziten Gleichung für den Oseen-Tensor das Koordinatensystem durch $\vec{r} - \vec{r}' \rightarrow \vec{r}$ verschoben und der Ansatz

$$O_{ij} = \alpha \delta_{ij} + \beta \frac{r_i r_j}{r^2} \quad (2.47)$$

gewählt. Die beiden Konstanten α und β lassen sich durch die Betrachtung der Spur und einer Tensorverjüngung bestimmen. Man erhält zunächst

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\mathbf{O}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{1}{8\pi^3\eta k^2} \text{Sp}(\mathbb{1} - \hat{k} \otimes \hat{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{1}{8\pi^3\eta k^2} (3 - 1) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{1}{8\pi^3\eta} \int_0^\infty dk \int_{-1}^1 d(\cos(\theta)) \int_0^{2\pi} d\varphi k^2 \frac{2}{k^2} e^{ikr \cos(\theta)} \\ &= \frac{1}{2\pi^2\eta} \int_0^\infty dk \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \\ &= \frac{1}{2\pi^2\eta} \int_0^\infty dk \frac{\sin(kr)}{kr} \\ &= \frac{1}{2\pi\eta r} \stackrel{\text{Ansatz}}{=} 3\alpha + \beta. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Dabei wurde das Integral explizit in Kugelkoordinaten berechnet. Die zweite Bestimmungsgleichung folgt aus

$$\begin{aligned} \hat{r}^T \mathbf{O} \hat{r} &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{1}{8\pi^3\eta k^2} \hat{r}^T (\mathbb{1} + \hat{k} \otimes \hat{k}) \hat{r} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{1}{8\pi^3\eta k^2} (1 - (\hat{k} \cdot \hat{r})^2) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{1}{8\pi^3\eta} \left[\int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{(\hat{k} \cdot \hat{r})^2}{k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Das erste Integral lässt sich durch Vergleich mit (2.48) lösen, da es sich lediglich um den Faktor 2 unterscheidet. Das zweite Integral wird wieder in Kugelkoordinaten gelöst und

es ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \frac{(\hat{k} \cdot \hat{r})^2}{k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} &= 2\pi \int_0^\infty dk \int_{-1}^1 d(\cos(\theta)) \cos^2(\theta) e^{ikr \cos(\theta)} \\
 &= 2\pi \int_0^\infty dk \int_{-1}^1 d(\cos(\theta)) \frac{\partial^2}{\partial k^2} \left[-\frac{1}{r^2} e^{ikr \cos(\theta)} \right] \\
 &= -\frac{2\pi}{r^2} \int_0^\infty dk \frac{\partial^2}{\partial k^2} \left[\frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \right] \\
 &= -\frac{2\pi}{r^3} \int_0^\infty dk \frac{\partial^2}{\partial k^2} \left[\frac{2 \sin(kr)}{k} \right]. \tag{2.50}
 \end{aligned}$$

Die Stammfunktion $\partial_k [2 \sin(kr)/k]$ kann an den Stellen $k = 0$ und $k \rightarrow \infty$ ausgewertet werden. Da $\sin(kr)/k$ im Unendlichen gegen 0 abfällt und an der Stelle $k = 0$ ein Maximum hat, verschwindet das Integral. Es verbleibt

$$\hat{r}^T \mathbf{O} \hat{r} = \frac{1}{4\pi\eta r} \stackrel{\text{Ansatz}}{=} \alpha + \beta. \tag{2.51}$$

Daraus ergibt sich nach kurzer Rechnung

$$\alpha = \beta = \frac{1}{8\pi\eta r}. \tag{2.52}$$

Der Oseen-Tensor lässt sich also durch

$$\mathbf{O}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\eta r} (\mathbb{1} + \hat{r} \otimes \hat{r}) \tag{2.53}$$

darstellen.

2.5.2 Hydrodynamische Wechselwirkung von N Teilchen

Im vorhergehenden Kapitel wurde ein Fluid im Regime kleiner Reynoldszahlen betrachtet, auf das eine Punktkraft wirkt. Nun soll die Wechselwirkung von N Teilchen hergeleitet werden, die sich in einer Flüssigkeit unter Einwirkung von externen Kräften bewegen. Dazu ist zunächst von Interesse, wie der Zusammenhang zwischen Kraft und Geschwindigkeit bei einem einzigen Kugelteilchen mit dem Radius a aussieht.

Man betrachtet hierfür eine Kugel, die von einer Flüssigkeit mit der Geschwindigkeit \vec{v} umströmt wird. Nach obigen Überlegungen ist wieder die Stokes-Gleichung (2.36) anzuwenden. Außerdem muss einerseits die Haftbedingung, andererseits das Verhalten im Unendlichen beachtet werden. Dies führt auf die Randbedingungen

$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{v} \quad \text{für } |\vec{r}| \rightarrow \infty, \tag{2.54}$$

$$\vec{u}(\vec{r}) = 0 \quad \text{für } |\vec{r}| = a. \quad (2.55)$$

Die Lösung dieses Randwertproblems liefert die bekannte Stokessche Reibungskraft [5]

$$\vec{F} = 6\pi\eta a \vec{v}. \quad (2.56)$$

Sind nun mehrere Teilchen in der Flüssigkeit, so wird deren Geschwindigkeit durch ihren Stokesschen Widerstand und durch die gegenseitige hydrodynamische Wechselwirkung bestimmt. Es gilt dann also für das i -te Teilchen

$$\dot{\vec{r}}_i = \frac{1}{6\pi\eta a} \vec{F}_i + \sum_{j=1; j \neq i}^N \mathbf{O}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \vec{F}_j. \quad (2.57)$$

Zusammenfassend lässt sich eine sogenannte *Mobilitätsmatrix*

$$\mathbf{H}_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{6\pi\eta a} \mathbb{1} & \text{für } j = i \\ \mathbf{O}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) & \text{für } j \neq i \end{cases} \quad (2.58)$$

definieren. Mit einer eventuell vorhandenen externen Strömung $\vec{u}_0(\vec{r})$ lautet der vollständige Ausdruck für die Geschwindigkeit des i -ten Teilchens dann

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{u}_0(\vec{r}_i) + \sum_{j=1}^N \mathbf{H}_{ij} \vec{F}_j. \quad (2.59)$$

2.5.3 Anwendung: Sedimentation von zwei Teilchen

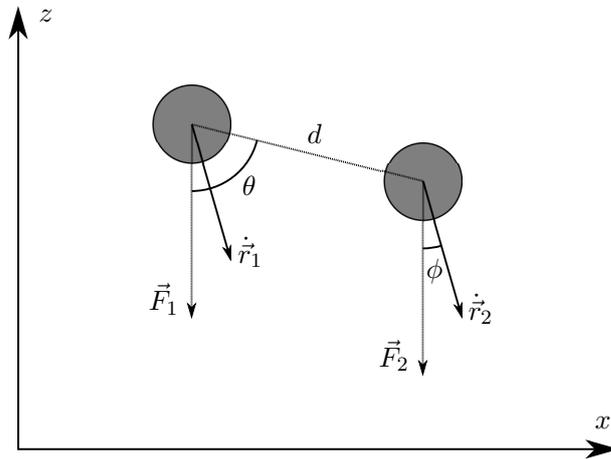


Abbildung 2.3: Schräge Sedimentation von zwei Teilchen mit Radius a im Abstand d .

Die explizite Herleitung von Trajektorien mithilfe der Mobilitätsmatrix ist meist nicht

2 Grundlagen der Hydrodynamik

analytisch möglich. Für manche Spezialfälle existiert jedoch eine solche Lösung. Im Folgenden werden als Beispiel dafür zwei Teilchen mit gleichem Radius a in festem Abstand d betrachtet. Auf diese wirkt die Gravitationskraft in negativer z -Richtung. Die Verbindungslinie der Teilchen liegt außerdem im Allgemeinen nicht in der horizontalen, sondern schließt mit der z -Achse den Winkel θ ein.

Dann kann beobachtet werden, dass die Teilchen wegen der gegenseitigen hydrodynamischen Wechselwirkung mit einem gewissen Winkel ϕ zur Gravitationsrichtung sedimentieren. Analytisch kann nun die stationäre Lösung von $\dot{\vec{r}}_1$ und $\dot{\vec{r}}_2$ durch

$$\dot{\vec{r}}_i = \sum_{j=1}^N \mathbf{H}_{ij} \vec{F}_j \quad (2.60)$$

bestimmt werden. Dazu wählt man zunächst die Anfangskoordinaten der Teilchen unter Verwendung der bekannten Parameter aus Abbildung 2.3 zu

$$\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{r}_2 = d \begin{pmatrix} \sin(\theta) \\ 0 \\ -\cos(\theta) \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad |\vec{r}_2 - \vec{r}_1| = d. \quad (2.61)$$

Die externe Kraft auf beide Teilchen ist mit

$$\vec{F}_1 = \vec{F}_2 = -F \vec{e}_z \quad (2.62)$$

gleich. Zur Bestimmung der hydrodynamischen Wechselwirkung wird der Oseen-Tensor dieses Problems bestimmt und lautet

$$\begin{aligned} \mathbf{O}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) &= \frac{1}{8\pi\eta d} \left(\mathbb{1} + \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \otimes (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}{d^2} \right) \\ &= \frac{1}{8\pi\eta d} \left(\mathbb{1} + \begin{pmatrix} \sin(\theta) \\ 0 \\ -\cos(\theta) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \sin(\theta) \\ 0 \\ -\cos(\theta) \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{8\pi\eta d} \begin{pmatrix} 1 + \sin^2(\theta) & 0 & -\sin(\theta) \cos(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) \cos(\theta) & 0 & 1 + \cos^2(\theta) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Wegen der Symmetrie des Oseen-Tensors und dem gleichen Radius beider Teilchen folgt sofort, dass die Geschwindigkeit beider Partikel gleich sein muss. Diese wird explizit ausgerechnet, wodurch

$$\dot{\vec{r}}_1 = \frac{1}{6\pi\eta a} \vec{F}_1 + \mathbf{O}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \vec{F}_2$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{6\pi\eta a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -F \end{pmatrix} + \frac{1}{8\pi\eta d} \begin{pmatrix} 1 + \sin^2(\theta) & 0 & -\sin(\theta) \cos(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) \cos(\theta) & 0 & 1 + \cos^2(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -F \end{pmatrix} \\
 &= \frac{F}{6\pi\eta a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{F}{8\pi\eta d} \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\theta) \\ 0 \\ -1 - \cos^2(\theta) \end{pmatrix} \\
 &= \frac{F}{8\pi\eta d} \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\theta) \\ 0 \\ -1 - \cos^2(\theta) - \frac{4d}{3a} \end{pmatrix} = \dot{\vec{r}}_2 \tag{2.64}
 \end{aligned}$$

erhalten wird. Diese Sedimentationsgeschwindigkeit kann mit der bekannten Geschwindigkeit eines einzelnen Teilchens von

$$\dot{\vec{r}}_{\text{einzel}} = \frac{F}{6\pi\eta a} \tag{2.65}$$

verglichen werden. Dazu betrachtet man die z-Komponente und stellt fest, dass

$$\begin{aligned}
 |\dot{r}_z| &= \frac{F}{8\pi\eta d} \left(1 + \cos^2(\theta) + \frac{4d}{3a} \right) \\
 &\geq \frac{F}{8\pi\eta d} \left(1 + \frac{4d}{3a} \right) = \frac{F}{8\pi\eta d} + \frac{F}{6\pi\eta a} > |\dot{\vec{r}}_{\text{einzel}}| \tag{2.66}
 \end{aligned}$$

gilt. Die Sedimentationsgeschwindigkeit von zwei Teilchen ist also für alle Winkel θ größer als die eines einzelnen Teilchens, was auf die hydrodynamische Wechselwirkung zurückgeführt werden kann.

Zusätzlich erfahren die Teilchen je nach Winkel θ eine Ablenkung in x-Richtung. Diese bleibt nur in den besonderen Konfigurationen $\theta = k\pi/2$, $k \in \mathbb{Z}$ aus. Das entspricht einer Ausrichtung der Verbindungsachse parallel zur Senkrechten bzw. Horizontalen. Der Winkel, den der Geschwindigkeitsvektor mit der z-Achse einschließt, berechnet sich trigonometrisch durch

$$\phi = \arctan \left(\frac{\dot{r}_x}{-\dot{r}_z} \right) = \arctan \left(\frac{\sin(\theta) \cos(\theta)}{1 + \cos^2(\theta) + \frac{4d}{3a}} \right). \tag{2.67}$$

Auffallend ist auch die Abhängigkeit vom Verhältnis d/a , also dem relativen Abstand der Partikel bezüglich deren Radius. Exemplarisch wird dafür im Folgenden $\theta = \pi/4$ gesetzt. Dies liefert

$$\phi = \arctan \left(\frac{\sin(\frac{\pi}{4}) \cos(\frac{\pi}{4})}{1 + \cos^2(\frac{\pi}{4}) + \frac{4d}{3a}} \right) = \arctan \left(\frac{1}{3 + \frac{8d}{3a}} \right). \tag{2.68}$$

3 Grundlagen der Numerik

Zum Erhalt von Teilchentrajektorien mit den oben genannten Methoden ist man im Allgemeinen vor das Problem gestellt, eine Differentialgleichung zu lösen. In vielen Fällen ist das analytisch nicht mehr möglich, weshalb nur numerische Verfahren Antworten auf bestimmte Fragestellungen in der Mikrofluidik geben. Die stets wachsende Rechenleistung von Computern ermöglicht dabei die Entwicklung weit fortgeschrittener und hochpräziser Algorithmen. Wie sich aber auch leicht verständliche und trotzdem genaue Lösungsmethoden finden und implementieren lassen, wird im Folgenden beschrieben.

3.1 Allgemeines zu Differentialgleichungen

Viele Probleme in der Physik lassen sich exakt durch Differentialgleichungen der Form

$$y^{(n)}(t) = f(t, y(t), y'(t), y''(t), \dots, y^{(n-1)}(t)) \quad (3.1)$$

formulieren. Im Allgemeinen kann die gesuchte Funktion y dabei auch vektoriell sein, sodass die Komponenten ein Differentialgleichungssystem bilden. Im Folgenden werden nur Differentialgleichungen bzw. -gleichungssysteme erster Ordnung betrachtet, das heißt

$$\vec{y}'(t) = \vec{f}(t, \vec{y}(t)). \quad (3.2)$$

Anzumerken ist, dass eine Differentialgleichung höherer Ordnung wie Gleichung (3.1) wiederum in ein System erster Ordnung durch

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ y' \\ \vdots \\ y^{(n-1)} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$\Rightarrow \vec{y}' = \begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \\ \vdots \\ y_n' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y' \\ y'' \\ \vdots \\ y^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ f(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

umgeschrieben werden kann, weshalb in den meisten Fällen die Betrachtung von Algorithmen für die erste Ordnung ausreicht. Ist ein Wert $\vec{y}(0) = \vec{y}_0$ gegeben, so handelt es sich um ein Anfangswertproblem, für das unterschiedliche Lösungsverfahren existieren.

3.2 Euler-Polygonzugverfahren

Zur Vereinfachung sei y wieder skalar. Um den Grundgedanken der folgenden Lösungsansätze zu verstehen, kann man sich eine Differentialgleichung durch ein Richtungsfeld veranschaulichen.

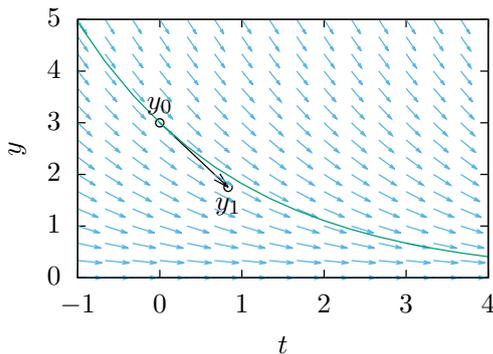


Abbildung 3.1: Richtungsfeld der Differentialgleichung $y' = -0,5y$ mit eingezeichneter Lösung für $y_0 = 3$. Der schwarze Pfeil veranschaulicht einen Euler-Schritt.

Wie in Abbildung 3.1 wird die Lösungsfunktion schrittweise mit dem jeweils vorliegenden Steigungswert approximiert. Mathematisch bedeutet das mit der Taylor-Entwicklung

$$y(t+h) = y(t) + hy'(t) + \mathcal{O}(h^2) = y(t) + hf(t, y) + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.5)$$

Die diskrete Berechnungsvorschrift für den Folgewert y_{i+1} bei einem gegebenen Wert y_i lautet also

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i). \quad (3.6)$$

Da bereits nach dem linearen Term abgebrochen wird, hat dieses Verfahren einen globalen Fehler von $\mathcal{O}(h)$ [12]. Zusätzlich wird beim Euler-Algorithmus die Instabilität oft zum Problem, was genauer in Kapitel 3.4 besprochen wird.

3.3 Runge-Kutta-Verfahren

Eine verbesserte Herangehensweise liefern die Runge-Kutta-Verfahren, die den Wert von f an mehreren Positionen auswerten und das Richtungsfeld somit genauer „sondieren“. Dabei gibt es mehrere Ausführungen; das bekannteste und in den nachfolgenden Kapiteln verwendete ist das klassische Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung (RK4), welches sich

durch den Iterationsschritt

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (3.7)$$

mit

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_i, y_i), & k_2 &= hf(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}), \\ k_3 &= hf(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}), & k_4 &= hf(t_i + h, y_i + k_3) \end{aligned}$$

auszeichnet [12]. Dieses liefert durch einen globalen Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(h^4)$ wesentlich genauere Ergebnisse, ist in der Berechnung allerdings aufwändiger. Zusätzlich zeigt sich jedoch auch bei der Stabilität ein Vorteil, wie im Folgenden erläutert wird.

3.4 Genauigkeit und Stabilitätskriterien

Vergleicht man beide genannten Algorithmen, fällt schnell die deutlich unterschiedliche Fehlerordnung auf. Mit $\mathcal{O}(h^4)$ ist das Runge-Kutta- wesentlich genauer als das Euler-Verfahren, welches nur $\mathcal{O}(h)$ aufweist. Beim Einsatz numerischer Verfahren ist allerdings immer fraglich, wie stark deren Ungenauigkeit im gesamten Kontext ins Gewicht fällt. Gerade bei unsicheren physikalischen Modellen oder qualitativen Untersuchungen kann der Einfachheit halber deshalb auch ein weniger präziser Algorithmus herangezogen werden. Dass sich in dieser Arbeit trotzdem zur hauptsächlichen Verwendung des Runge-Kutta-Algorithmus entschlossen wird, liegt neben der Präzision auch an dessen stabilerem Verhalten.

Bestimmung des Stabilitätsgebietes [13]: Gleichungen wie (2.59) können im Allgemeinen als Differentialgleichungssystem der Form

$$\vec{y}' = \mathbf{A}\vec{y} \quad (3.8)$$

mit einer Matrix \mathbf{A} betrachtet werden. Das Euler-Verfahren liefert hier den Iterationsschritt

$$\vec{y}_{i+1} = \vec{y}_i + h\mathbf{A}\vec{y}_i = (\mathbb{1} + h\mathbf{A})\vec{y}_i. \quad (3.9)$$

Die Vektoren \vec{y}_{i+1} und \vec{y}_i lassen sich in einer Eigenbasis $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_d\}$ von \mathbf{A} mit den Koeffizienten $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d\}$ für den jeweiligen Schritt durch

$$\vec{y}_i = \sum_{n=1}^d \alpha_n^{(i)} \vec{b}_n, \quad (3.10)$$

$$\vec{y}_{i+1} = \sum_{n=1}^d \alpha_n^{(i+1)} \vec{b}_n \quad (3.11)$$

darstellen. Andererseits lässt sich aber \vec{y}_{i+1} mit Gleichung (3.9) zu

$$\vec{y}_{i+1} = (\mathbb{1} + h\mathbf{A})\vec{y}_i = \sum_{n=1}^d \alpha_n^{(i)} (\mathbb{1} + h\mathbf{A})\vec{b}_n = \sum_{n=1}^d \alpha_n^{(i)} (1 + h\lambda_n) \vec{b}_n \quad (3.12)$$

berechnen. Hier sind $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d\}$ die entsprechenden Eigenwerte von \mathbf{A} . Vergleicht man Gleichung (3.12) mit (3.11) und nutzt die Eindeutigkeit der Darstellung durch eine Eigenbasis aus, erhält man

$$\alpha_n^{(i+1)} = (1 + h\lambda_n) \alpha_n^{(i)}. \quad (3.13)$$

Soll die Lösung nicht divergieren, muss

$$|1 + h\lambda_n| < 1, \quad n = 1; 2; \dots; d \quad (3.14)$$

gelten. Somit ist der Stabilitätsbereich durch die Eigenwerte der Matrix des Differentialgleichungssystems festgelegt. Obige Gleichung beschreibt einen Kreis in der komplexen Ebene mit Mittelpunkt $z = -1$ und Radius 1; in diesem muss jedes $h\lambda_n$ liegen, damit das Euler-Verfahren konvergiert.

Allgemein reicht es also aus, das skalare Problem

$$y' = \lambda y \quad (3.15)$$

zu betrachten, um auf die Stabilität eines Verfahrens zu schließen. Dabei sei λ ein Eigenwert der Matrix \mathbf{A} . Damit kann nun gezeigt werden, dass der Runge-Kutta-Algorithmus ein größeres Stabilitätsgebiet besitzt. Einschrittverfahren wie die beiden hier betrachteten können nämlich durch

$$y_{i+1} = P(h\lambda)y_i \quad (3.16)$$

beschrieben werden, wenn man sie auf die Testgleichung (3.15) anwendet. Beim Euler-Verfahren ist $P(z) = 1 + z$. Für das Runge-Kutta-Verfahren erhält man analog

$$P(z) = 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{6}z^3 + \frac{1}{24}z^4. \quad (3.17)$$

Aus obiger Herleitung ist bekannt, dass

$$|P(h\lambda)| < 1 \quad (3.18)$$

für jeden Eigenwert λ gelten muss, um einen stabilen Algorithmus zu erhalten. $P(z)$ wird deshalb auch als *Stabilitätsfunktion* bezeichnet.

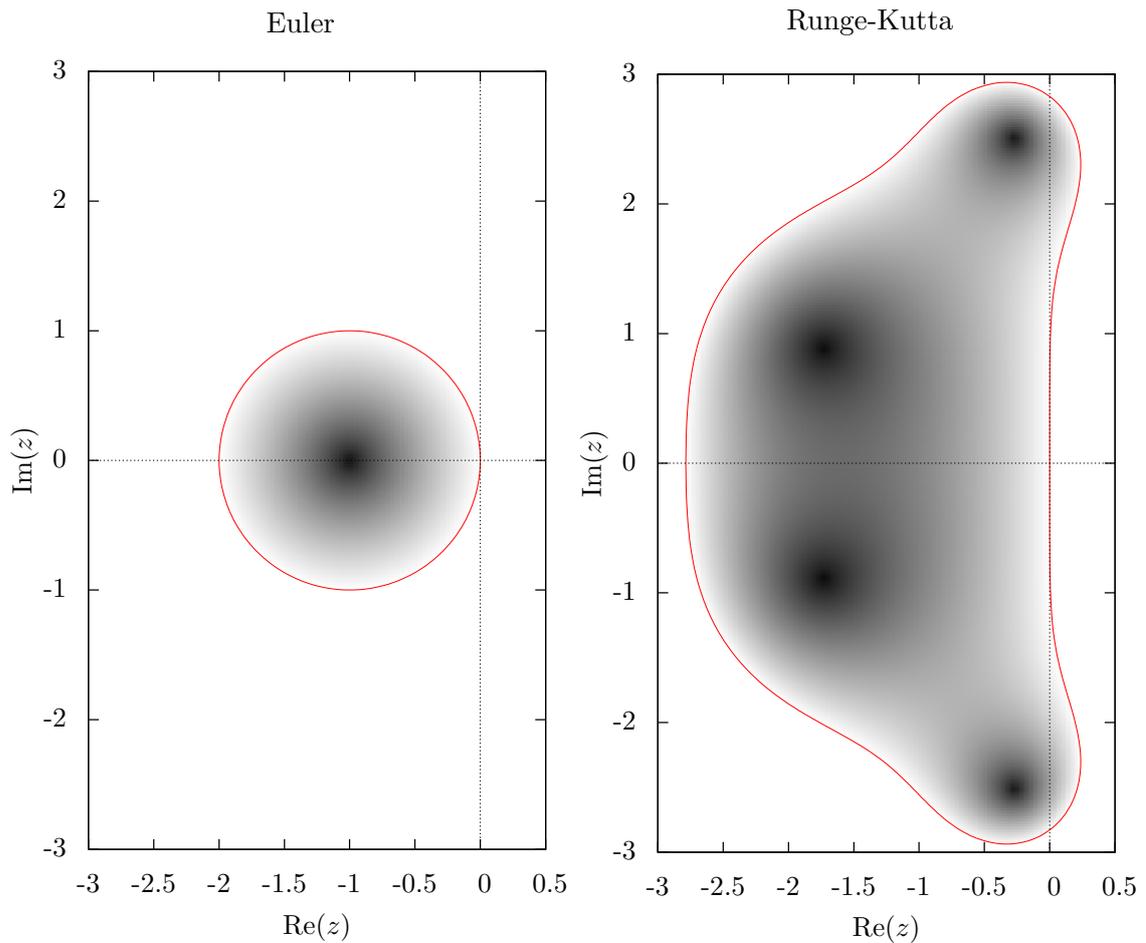


Abbildung 3.2: Stabilitätsgebiete von Euler- und Runge-Kutta-Algorithmus. Die rote Linie symbolisiert die durch Gleichung (3.18) gegebene Grenze, die Graufärbung entspricht dem Wert von $|P(z)|$ und damit der Konvergenzgeschwindigkeit.

Durch einfaches Auftragen von Gleichung (3.18) in der komplexen Ebene erhält man einen direkten Vergleich der Stabilitätsgebiete unterschiedlicher Verfahren. In Abbildung 3.2 geschieht dies für den Euler- und Runge-Kutta-Algorithmus.

4 Sedimentationsverhalten von Mikropartikeln

4.1 Aufbau des Programms

Nachdem nun die theoretischen Grundlagen zur numerischen Integration von Differentialgleichungen und -gleichungssystemen dargelegt wurden, widmet sich dieser Teil der Arbeit der konkreten Anwendung auf Mikropartikel. Dazu werden entsprechende Programme geschrieben, die das Verhalten von kleinen Teilchen in einer Flüssigkeit mithilfe der Stokes-Gleichung und dem daraus erhaltenen Oseen-Tensor simulieren sollen. Als Programmiersprache wird *C* gewählt und die gewonnenen Daten werden mit *GNUPlot* visualisiert. Man stellt fest, dass trotz leicht unterschiedlicher Problemstellungen das Fundament des Programms gleich bleibt und mit wenigen Abänderungen an das zu betrachtende System angepasst werden kann. Deshalb wird im Folgenden der Grundgedanke bei der Programmierung dargestellt und die Funktionsweise des Programmgerüsts erläutert.

4.1.1 Grundstruktur der Simulation

Zunächst werden alle benötigten Konstanten und Variablen angelegt und initialisiert. Neben festen Größen wie der Viskosität, dem Radius der Teilchen und konstanten Kräften wie der Gravitation sind insbesondere die veränderlichen Positionen von Interesse, um eine Trajektorie zu erhalten. Deshalb werden die Koordinaten der Teilchen in einem zweidimensionalen Feld dargestellt, wobei die erste Dimension die Teilchennummer beschreibt und die zweite die Komponente des Ortsvektors. Gerade dadurch erhält man eine gewisse Generizität bezüglich der Teilchenanzahl, da die Größe des Arrays auf diese angepasst werden kann.

Zu Beginn werden die Positionen initialisiert sowie die Ausgabedatei vorbereitet. Dann folgt schließlich das numerische Verfahren, das in einer Schleife die neuen Positionen der Teilchen Schritt für Schritt ermittelt. Zur Auswahl stehen hierbei der Euler- und der Runge-Kutta-Algorithmus. Bei beiden ist auf eine sinnvoll gewählte Schrittweite zu achten, die sich an den zuvor besprochenen Stabilitätskriterien dieser Verfahren orientiert. Den Kern des Programms bildet die Implementierung des physikalischen Modells der

4 Sedimentationsverhalten von Mikropartikeln

Stokes-Gleichung durch den Oseen-Tensor. Dafür wird eine Methode geschrieben, die das jeweils benötigte Matrixelement dieses Tensors berechnet. Der Methode müssen dafür die beiden Teilchen übergeben werden, zwischen denen der Oseen-Tensor vermitteln soll. Mit diesen Vorkehrungen lässt sich schließlich auch das Geschwindigkeitsfeld berechnen, das jeweils auf jedes Teilchen wirkt. Dazu wird sowohl die direkt am Teilchen angreifende externe Kraft, als auch die durch die anderen Partikel verursachte hydrodynamische Wechselwirkung mithilfe der Mobilitätsmatrix berechnet.

Das gewählte iterative Verfahren ermittelt mit diesen Geschwindigkeiten nun die neuen Positionen der Teilchen, welche in einer Datei ausgegeben werden. Die Ergebnisse können dann geplottet werden.

4.1.2 Testprogramm: Sedimentation von zwei Teilchen

Um die Funktionsweise einzelner Methoden sowie des gesamten Programms zu testen, erscheint es zunächst sinnvoll, einen bekannten Fall zu simulieren. Aus den vorhergehenden Erläuterungen bietet sich dafür das Sedimentationsverhalten zweier Teilchen in festem Abstand an, da für dieses Problem eine analytische Lösung existiert. Diese kann daher mit den Ergebnissen der numerischen Berechnung verglichen werden. Die Parameter wurden gemäß Tabelle 4.1 zur Simulation der Trajektorien gewählt.

Tabelle 4.1: Parameter bei der Sedimentation von zwei Teilchen

Parameter	Viskosität η	Gewichtskraft G	Radius a	Abstand d
Wert	1	1	1	3

Die Trajektorien der Teilchen stimmen für alle getesteten Abstände und Winkel mit der analytischen Lösung überein, wie Abbildungen 4.1 und 4.2 zeigen. Daraus lässt sich schließen, dass die berechneten Werte des Oseen-Tensors und des Geschwindigkeitsfeldes korrekt ermittelt werden. Auch die Iterationsschritte laufen offensichtlich richtig ab. Was man durch dieses Testbeispiel allerdings nicht überprüfen kann, ist die Schrittstabilität und Genauigkeit der verwendeten numerischen Verfahren. Durch den geradlinigen Verlauf können sich keine Fehler akkumulieren, weshalb auch bei diesem Beispiel der Euler-Algorithmus und das Runge-Kutta-Verfahren keine abweichenden Ergebnisse liefern. Dafür müsste zumindest ein in der Bewegungsrichtung variables System betrachtet werden, welches aber nicht mehr durch eine einfache Rechnung lösbar ist.

4.1.3 Erweiterung um Strömungsfeld und Wechselwirkungen

Da das Fundament des Programms nun vorhanden ist und in seiner Funktionsweise getestet wurde, können weitere Verallgemeinerungen zur Simulation komplexerer Zusammenhänge implementiert werden. Ziel ist es, Gleichung (2.59) vollständig einzubinden und

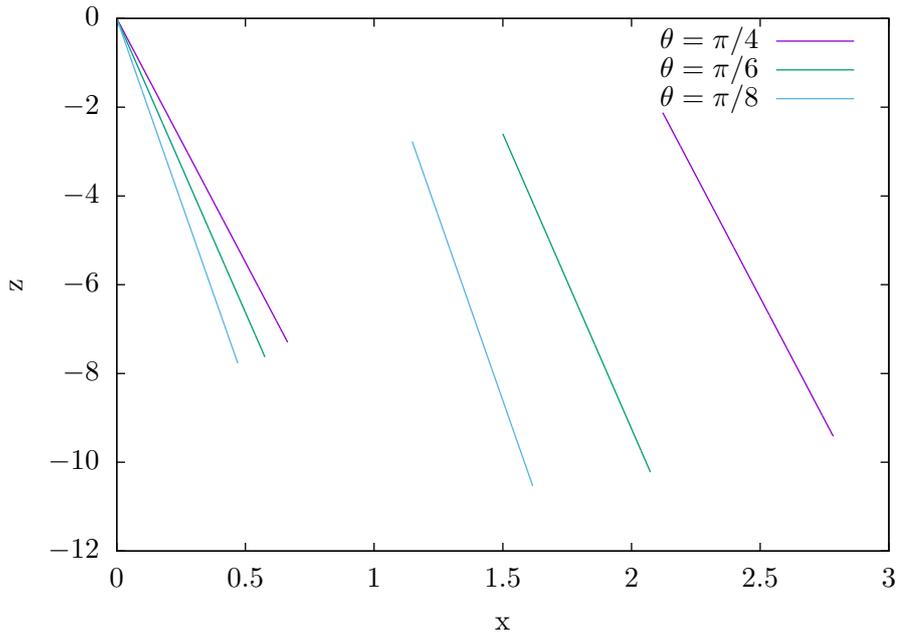


Abbildung 4.1: Trajektorien zweier Teilchen bei der Sedimentation. Der schräge und parallele Verlauf ist deutlich zu erkennen. Man beachte die unterschiedliche Skaleneinteilung; die Teilchen haben immer den Abstand $d = 3$.

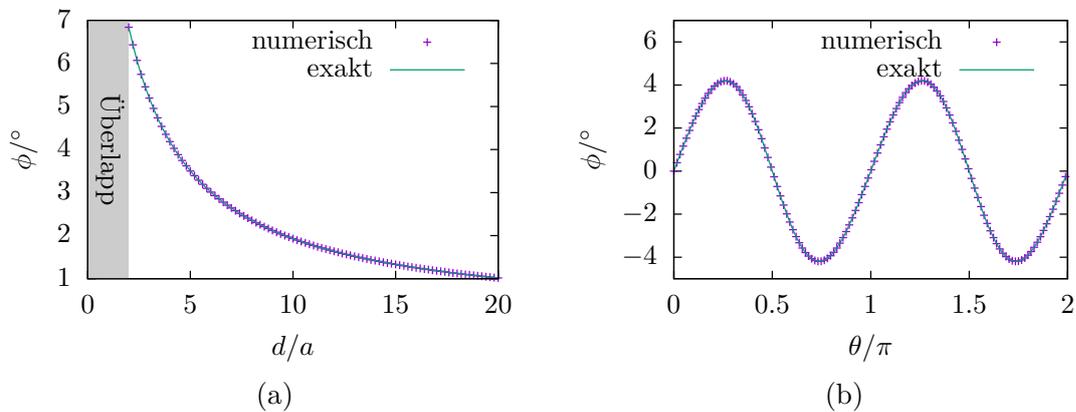


Abbildung 4.2: Numerische und analytische Berechnung des Sedimentationswinkels von zwei sedimentierenden Teilchen in Abhängigkeit (a) des Abstandes d zwischen den Teilchen bei $\theta = \pi/4$ bzw. (b) Werten des Winkels der Verbindungsachse zur Senkrechten bei $d = 3a$. Die numerischen stimmen sehr gut mit den analytischen Ergebnissen überein.

somit das Programm um einen externen Fluss - beispielsweise eine Poiseuille-Strömung - und eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen zu erweitern. Für letztere kann modellhaft von einem harmonischen Potential, also einer Federkraft ausgegangen werden, um etwaige Deformierbarkeiten eines Kollektivs aus Kugelteilchen nachzubilden. Das Teilchen i erfährt hierbei die Wechselwirkungen von allen anderen $N - 1$ Teilchen, welche sich zu einer Nettokraft

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1; j \neq i}^N \vec{F}_{ij} \quad (4.1)$$

summieren. Dabei ist anzumerken, dass die Anzahl an Wechselwirkungen gemäß

$$\frac{N(N-1)}{2} \sim N^2 \quad (4.2)$$

ansteigt, und damit relativ schnell rechenintensiv wird.

Will man beispielsweise das Hookesche Gesetz modellieren, so folgt für die Interaktion zwischen Teilchen i und j

$$\vec{F}_{ij} = D(|\vec{r}_j - \vec{r}_i| - d_0) \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|}. \quad (4.3)$$

D ist hierbei eine phänomenologische Federkonstante und d_0 der Gleichgewichtsabstand zwischen zwei Partikeln. Zu beachten ist jedoch, dass dieser groß genug im Vergleich zu den Kugelradien gewählt werden muss, wenn sich die Teilchen nicht überlappen sollen. Zumindest der Oseen-Tensor als Näherung für das Fernfeld einer umströmten Kugel liefert dann falsche Ergebnisse [14].

Zur Realisierung einer externen Strömung muss deren Geschwindigkeitsvektor am entsprechenden Ort einfach zu denen der jeweiligen Teilchen addiert werden. Da in dieser Arbeit das Sedimentationsverhalten in einer ruhenden Flüssigkeit untersucht wird, ist diese Geschwindigkeit konstant Null.

4.1.4 Optimierung mit Rotne-Prager-Tensor

Bei ersten Tests des Programms fällt auf, dass sich gerade sehr nahe kommende Teilchen unphysikalisch verhalten, und teilweise sogar numerische Fehler in Form von Unstetigkeiten bzw. großen Sprüngen der Koordinatenwerte generieren. Dies liegt an der Gestalt des Oseen-Tensors und seinem Verhalten für $d \rightarrow 0$. Man betrachte dazu folgendes Beispiel: Zwei Teilchen mit Radius a sind durch eine Feder mit der Ruhelänge $d_0 > 2a$ verbunden und befinden sich in einer ruhenden Flüssigkeit. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit ist das erste Teilchen im Ursprung, das zweite bei $(0; 0; z)$. Dann kann man die erwartete

Geschwindigkeit der Teilchen gemäß

$$\dot{\vec{r}}_1 = \frac{1}{6\pi\eta a} \vec{F}_1 + \mathbf{O}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \vec{F}_2 \quad (4.4)$$

berechnen. Aus der Symmetrie der Konstellation folgt $|\dot{\vec{r}}_1| = |\dot{\vec{r}}_2|$. Der Oseen-Tensor hat durch die Anordnung zu Beginn die einfache Gestalt

$$\mathbf{O}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \frac{1}{8\pi\eta z} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Daraus ergibt sich mit der Federkraft $\vec{F}_{1,2} = \pm D(z - d_0)\vec{e}_z$

$$|\dot{\vec{r}}_1| = \frac{1}{6\pi\eta a} D(z - d_0) - \frac{2}{8\pi\eta z} D(z - d_0) = \frac{D}{\pi\eta} (z - d_0) \left(\frac{1}{6a} - \frac{1}{4z} \right). \quad (4.6)$$

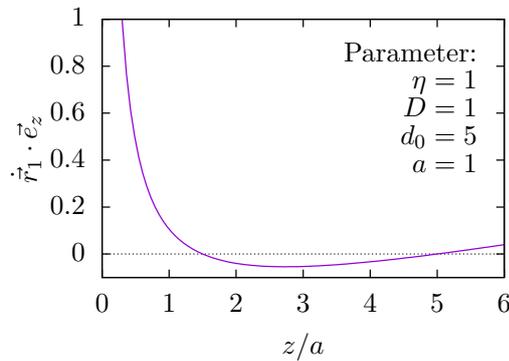


Abbildung 4.3: Teilchengeschwindigkeit in Richtung der Verbindungsline zweier Teilchen als Funktion des Abstandes. Positive Werte bedeuten Anziehung, negative Abstoßung. Das stark anziehende Verhalten für sehr kleine Abstände ist aber physikalisch nicht sinnvoll.

Die Funktion wird Null für $z = d_0$ und $z = 1,5a$. Diese zweite Nullstelle und das anziehende Verhalten für noch kleinere Abstände (siehe Abbildung 4.3) macht aber im Rahmen der gewählten Annahmen keinen physikalischen Sinn und ist auf die Singularität des Oseen-Tensors bei $d = 0$ zurückzuführen. Dies folgt unmittelbar aus der Herleitung in Kapitel 2.5.1, in der von Kraftpunkten ohne endliche Ausdehnung ausgegangen wurde. Mathematisch äußert sich diese Eigenschaft in der Verletzung der positiven Definitheit des Oseen-Tensors für $|\vec{r}| < 1,5a$ [14].

Will man dieses Problem umgehen, so kann man einerseits Parameter vermeiden, bei denen sich die Teilchen zu nahe kommen, oder eine andere Wechselwirkung wie zum Beispiel ein Lennard-Jones-Potential verwenden. Eine weitere Möglichkeit ist die Berücksichtigung des endlichen Kugelradius, was durch den Rotne-Prager-Tensor

$$\boldsymbol{\mu}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\eta|\vec{r}|} \left[\left(\mathbb{1} + \frac{\vec{r} \otimes \vec{r}}{|\vec{r}|^2} \right) + \frac{2a^2}{3|\vec{r}|^2} \left(\mathbb{1} - \frac{\vec{r} \otimes \vec{r}}{|\vec{r}|^2} \right) \right] \quad (4.7)$$

geschieht, welcher ohne Beweis verwendet wird [2, 15]. Mit dieser Erweiterung, die im Grenzfall großer Abstände in den Oseen-Tensor übergeht, treten nun zumindest keine numerischen Fehler mehr auf, da die Kugeln auch bei starker Annäherung noch eine auseinandertreibende Geschwindigkeit erfahren. Dennoch handelt es sich weiterhin um eine Approximation mit einem Fehler der Ordnung $\mathcal{O}\left((a/|\vec{r}|)^4\right)$ [14], weshalb die physikalische Aussagekraft für kleine Abstände trotzdem hinterfragt werden muss. Es existieren weitere Korrekturterme. Bei allen Ergebnissen sind deshalb die Teilchenabstände zu überprüfen, und gegebenenfalls andere Parameter wie eine größere Federkonstante zu wählen.

4.2 Sedimentation eines deformierbaren 3-Teilchen-Modells

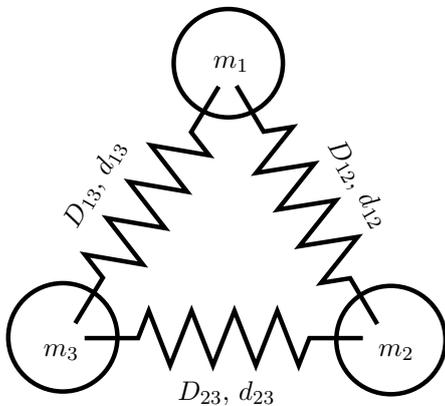


Abbildung 4.4: Aufbau des Teilchenkollektivs und Bezeichnung der unterschiedlichen Größen. Im Allgemeinen gibt es drei verschiedene Teilchen $i = 1; 2; 3$ mit unterschiedlichen Massen m_i und Federn der Länge d_{ij} mit der Federkonstante D_{ij} ($i < j$).

Die Sedimentation von deformierbaren Teilchen ist beispielsweise besonders in der Meeresforschung von großer Bedeutung [3]. Dort tragen vor allem kleine Partikel in Form von Mikroplastik zur Verunreinigung von Gewässern bei. Wegen ihrer geringen biologischen Abbaubarkeit sind sie sehr lange nachweisbar, sodass insbesondere deren Transport durch Strömungen und Sedimentation von Interesse ist. Zunächst kann man sich auf zwei Dimensionen beschränken. Um hierbei möglichst allgemein deformierbare Mikropartikel zur numerischen Untersuchung zu beschreiben, geht man modellhaft von drei wechselwirkenden Kugeln aus. Diese interagieren gemäß eines Federgesetzes mit den Federkonstanten D und Ruhelängen d miteinander, wobei sich die relativ große Härte von Mikroplastik in einer entsprechend hohen Federkonstante äußert. Nicht zuletzt kann man aber ohne Weiteres auch weiche Partikel mit diesem Modell beschreiben, sofern man denn eine genügend gute Approximation der hydrodynamischen Wechselwirkung für kleine Teilchenabstände in Form des Rotne-Prager-Tensors heranzieht.

Für qualitative Betrachtungen richtet sich die Wahl der Parameter von Teilchenkollektiv und Fluid nach der Hervorhebung der jeweils zu beobachtenden Effekte. Die Behandlung

realitätsnäherer Werte zur Nachempfindung echter Mikropartikel geschieht weiter unten bei der quantitativen Untersuchung.

4.2.1 Homogene und symmetrische Anordnung

Tabelle 4.2: Parameter bei der Sedimentation des Drei-Teilchen-Kollektivs

Parameter	η	G	a	Masse m	Ruhelänge d_0	Federkonstante D
Wert	1	1	0,5	1	5	1

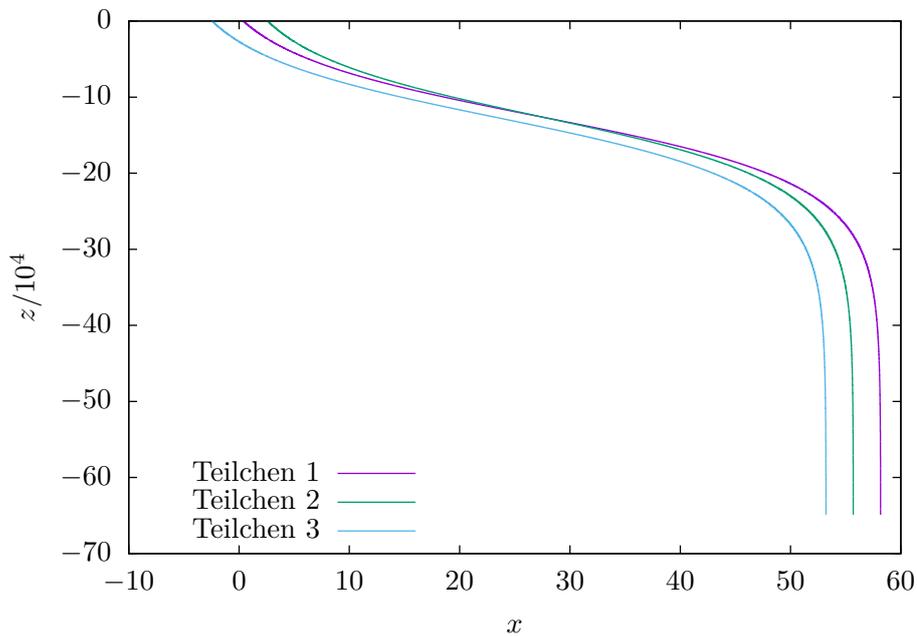


Abbildung 4.5: Sedimentation eines Dreiecks mit gleichen Teilchen. Während eines Transienten driftet das Kollektiv zur Seite, bis die stabile Orientierung erreicht ist und eine Spitze nach unten zeigt. Danach sinkt es senkrecht. Welches der Teilchen die nach unten zeigende Spitze bildet (hier Teilchen 2), hängt von den Anfangsbedingungen ab, da alle Teilchen gleichberechtigt sind.

Im einfachsten Fall ist ein sedimentierendes Teilchen homogen und symmetrisch. Im Modell lässt sich das durch drei identische Kugeln und Federn realisieren, das heißt

$$\begin{aligned}
 m_1 &= m_2 = m_3 = m, \\
 D_{12} &= D_{13} = D_{23} = D, \\
 d_{12} &= d_{13} = d_{23} = d_0
 \end{aligned}$$

gemäß Tabelle 4.2. Nun kann überprüft werden, unter welchen Umständen die Sedimentation senkrecht verläuft und wann sie eine Ablenkung erfährt.

Um stabile Ausrichtungen bei der Sedimentation zu untersuchen, wird das Kollektiv im Folgenden immer mit einer Spitze nach oben initialisiert, wobei zusätzlich eine kleine Störung zur Brechung der Symmetrie existiert. Im vorliegenden Fall ist diese Orientierung nicht stabil; das Kollektiv richtet sich nach einiger Zeit mit einer Spitze nach unten aus. Während der dafür nötigen Drehung erfährt es einen Transienten in x-Richtung (vergleiche Abbildung 4.5). Dieses Orientierungsverhalten lässt sich auch bei anderen deformierbaren Partikelformen in sehr guter Übereinstimmung beobachten. So zeigen beispielsweise biegsame Filamente im Regime hoher Festigkeit eine Sedimentationstrajektorie der selben Art, wenn sie sich aus einer instabilen Lage heraus bewegen [16].

Die hier vorliegenden Trajektorien variieren mit den Werten der Gravitation und der Federhärte. Es ist jedoch nur das Verhältnis beider Größen entscheidend. Denn vergleicht man die Zeitentwicklung unter G und D mit der bei $G' = kG$ und $D' = kD$ ($k \in \mathbb{R}^+$), so gilt

$$\vec{F}'_j = k\vec{F}_j, \quad j = 1; 2; \dots; N \quad (4.8)$$

wegen der Linearität der Kräfte bezüglich G und D . Damit ist aber

$$\dot{\vec{r}}'_i = \sum_{j=1}^N \mathbf{H}_{ij} \vec{F}'_j = \sum_{j=1}^N \mathbf{H}_{ij} k\vec{F}_j = k \sum_{j=1}^N \mathbf{H}_{ij} \vec{F}_j = k\dot{\vec{r}}_i. \quad (4.9)$$

Somit verläuft $\dot{\vec{r}}'_i$ und $\dot{\vec{r}}_i$ für jedes Teilchen i parallel. Das bedeutet, dass die selben räumlichen Trajektorien entstehen, dies jedoch mit unterschiedlicher Geschwindigkeit.

4.2.2 Variation der Massen

Als nächstes werden inhomogene Partikel betrachtet. Zunächst wird nur eine Masse variiert. Die Erkenntnisse aus dem vorherigen Kapitel legen nahe, dass bei der Wahl einer schwereren Kugel diese sich nach unten orientieren müsste, und das Teilchen nach dem Transienten wiederum senkrecht sedimentieren sollte. Genau dieses Ergebnis ist in Abbildung 4.6a zu erkennen. Die Orientierung erfolgt dabei viel schneller als bei einem homogenen Kollektiv, weshalb die x-Drift auch nicht so groß ist.

Interessanter ist der Fall

$$m_1 < m_2 = m_3 \quad (4.10)$$

Dort ist bei hinreichend großem Unterschied die Ausrichtung des leichteren Teilchens nach oben stabil (siehe Abbildung 4.6b). In beiden Fällen reichen schon relativ geringe Abweichungen, um diese Effekte zu beobachten. So wurde m_1 lediglich um 10% variiert. Zwischen den beiden Konfigurationen gibt es einen sehr schmalen Bereich, in dem die

4.2 Sedimentation eines deformierbaren 3-Teilchen-Modells

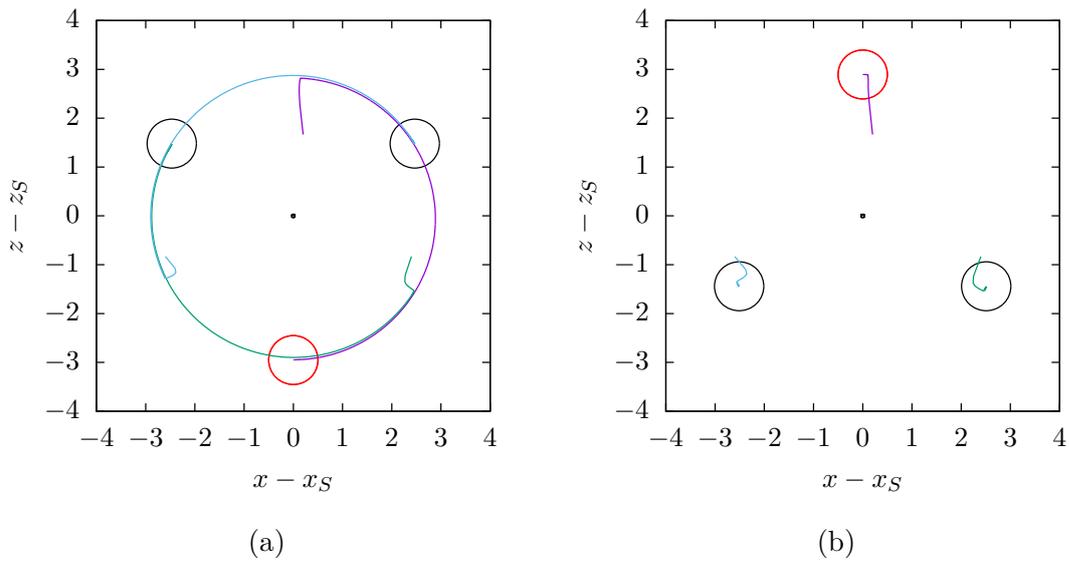


Abbildung 4.6: Relativbewegung bei (a) einer schwereren und (b) einer leichteren Masse von Teilchen 1 (rot). Der Ursprung entspricht dem geometrischen Zentrum (x_S, z_S) des Kollektivs. Die Kreise symbolisieren die Kugeln in den stabilen Konfigurationen. Das schwere Teilchen orientiert sich nach unten, das leichte nach oben.

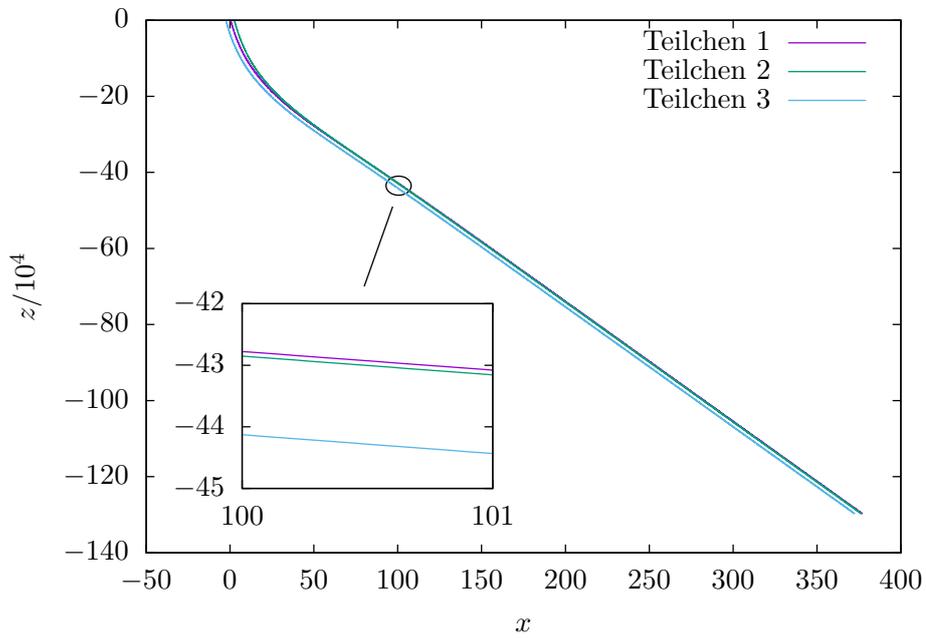


Abbildung 4.7: Sedimentation eines fast homogenen Teilchens mit gleichen Seitenlängen und $m_1 = 0,9999m_{2/3}$. Man erkennt die x-Drift.

Verbindungsline Schwerpunkt-Spitze nicht parallel zur Senkrechten steht. Dann erfährt das Kollektiv eine Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung und sedimentiert schräg. Dieses Verhalten folgt aus dem einigermaßen stetigen Übergang zwischen beiden Konfigurationen in Abbildung 4.6. Da ein schwereres Teilchen nach unten zeigt, ein leichteres aber nach oben, muss es einen Bereich geben, in dem sich beide Anordnungen in etwa gleichermaßen konkurrieren. Die Folge ist eine Ausrichtung, die zwischen beiden Grenzfällen liegt. Die Asymmetrie des gedrehten Kollektivs bezüglich der z-Achse bewirkt dann aber durch hydrodynamische Wechselwirkung eine x-Drift, wie in Abbildung 4.7 zu erkennen ist. Man beachte jedoch, dass der Massenunterschied sehr klein ($\Delta m/m_1 < 0,1\%$) sein muss, um dieses Verhalten zu beobachten.

Haben alle Kugeln paarweise unterschiedliche Massen, so folgt durch die hydrodynamische Wechselwirkung im Allgemeinen eine Translation in x-Richtung, da keine Symmetrieachse existiert. Bei hinreichender Inhomogenität sedimentieren Partikel also in der Regel nicht senkrecht.

4.2.3 Variation der Form

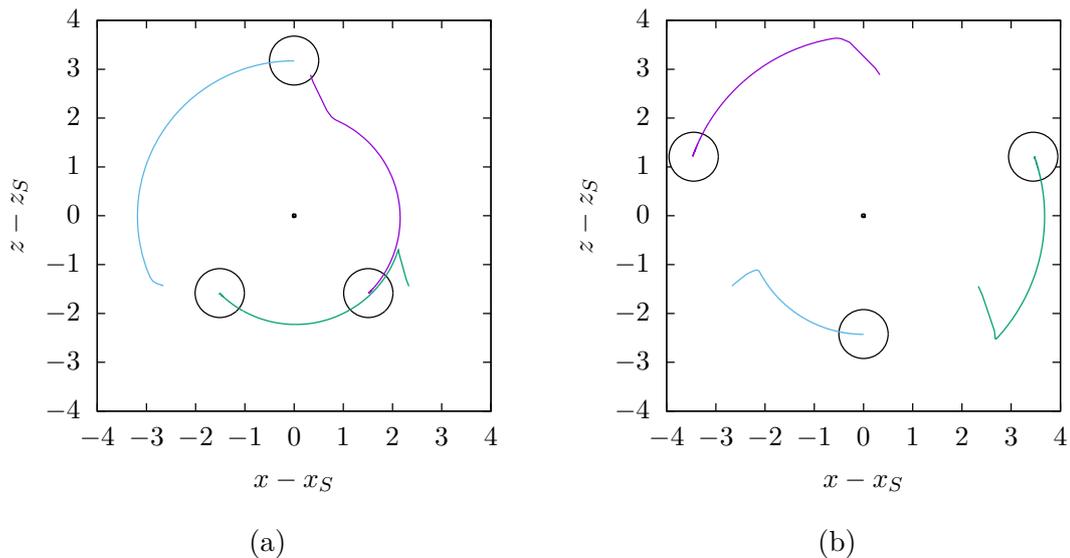


Abbildung 4.8: Relativbewegung der Teilchen bei (a) einer kürzeren und (b) einer längeren Seite. Die Kreise stellen wieder die stabilen Endkonfigurationen dar, wobei eine kürzere Seite nach unten und eine längere nach oben zeigt.

Eine weitere Veränderung der Partikel betrifft deren Form. Im Allgemeinen sind diese nämlich nicht kugelförmig, sondern haben unterschiedlich stark ausgeprägte Abplattungen und Ausbeulungen. Die einfachste Möglichkeit, diesen Sachverhalt zu modellieren, ist die Variation der Federlängen im Drei-Teilchen-Modell. Aufgrund der Geometrie können

diese aber nicht unabhängig voneinander gewählt werden, sondern sollten die Dreiecksungleichung

$$|d_{13} - d_{23}| \leq d_{12} \leq d_{13} + d_{23} \quad (4.11)$$

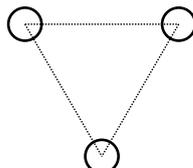
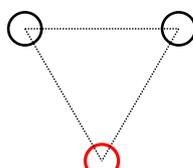
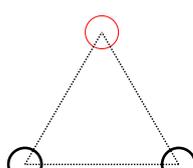
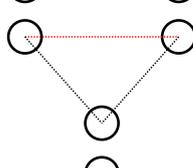
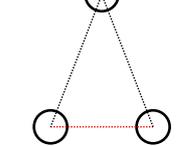
in etwa erfüllen, da es sich lediglich um deformierbare Verbindungen handelt. Zunächst kann wieder nur eine Seite verändert werden.

Bei einer Längenvergrößerung dreht sich das der langen Seite gegenüberliegende Teilchen nach unten. Bei einer Verkürzung orientiert sich die kurze Seite nach unten. Es treten also wie oben wieder zwei komplementäre Konfigurationen auf, die in Abbildung 4.8 dargestellt sind. Bei nur geringen Längenunterschieden gibt es deshalb einen zu oben analogen Konkurrenzprozess, sodass sich dann das Kollektiv schräg stellt und die Sedimentation entsprechend eine x-Komponente aufweist.

4.2.4 Überblick

Zusammenfassend lässt sich also eine Tabelle erstellen, in der die stabile Ausrichtung des Kollektivs und seine mögliche x-Drift aufgezeigt werden.

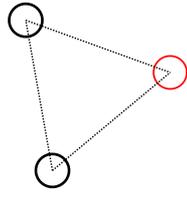
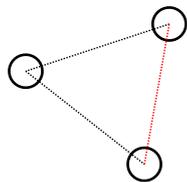
Tabelle 4.3: Stabile Konfigurationen ohne x-Drift

	$m_1 = m_2 = m_3$ $d_{12} = d_{13} = d_{23}$	senkrecht, eine Spitze nach unten (je nach Ausgangslage)
	$m_1 > m_2 = m_3$ $d_{12} = d_{13} = d_{23}$	senkrecht, schwere Spitze nach unten
	$m_1 < m_2 = m_3$ $d_{12} = d_{13} = d_{23}$	senkrecht, leichte Spitze nach oben
	$m_1 = m_2 = m_3$ $d_{12} > d_{13} = d_{23}$	senkrecht, lange Seite nach oben
	$m_1 = m_2 = m_3$ $d_{12} < d_{13} = d_{23}$	senkrecht, kurze Seite nach unten

4 Sedimentationsverhalten von Mikropartikeln

Alle Anordnungen, die eine ausgeprägte Symmetrieachse besitzen, sedimentieren also senkrecht. Ausgeprägt bedeutet hier, dass der Massen- bzw. Längenunterschied hinreichend groß ist. Bei einer fast entarteten Symmetrie - das heißt dass der Massen- oder Längenunterschied nur sehr gering ist - orientiert sich das Kollektiv in einem bestimmten nichttrivialen Winkel an und erfährt dann eine x-Drift.

Tabelle 4.4: Stabile Konfigurationen mit x-Drift

	$m_1 \lesssim m_2 = m_3$ $d_{12} = d_{13} = d_{23}$	x-Drift, gedreht
	$m_1 = m_2 = m_3$ $d_{12} \lesssim d_{13} = d_{23}$	x-Drift, gedreht

Zuletzt ist im Falle einer Abänderung von mindestens zwei Größen im Allgemeinen eine schräge Sedimentation zu erwarten, da der Teilchenverbund dann keine Symmetrieachse besitzt. In besonderen Fällen ist aber eine gegenseitige Aufhebung der x-Komponenten nicht auszuschließen.

4.2.5 Quantitative Untersuchung des Sedimentationswinkels

Um nun quantitative Ergebnisse zu erhalten, wird im Folgenden der Sedimentationswinkel in Abhängigkeit der gewählten Asymmetrien betrachtet. Aus den obigen Erkenntnissen ist bekannt, dass mindestens zwei Modellparameter verändert werden müssen, um die Symmetrie zu brechen. Zunächst werden eine Masse und eine anliegende Seitenlänge (ohne Beschränkung der Allgemeinheit m_1 und d_{12}) abgeändert und die restlichen Größen nach Tabelle 4.5 festgehalten.

Tabelle 4.5: Festgehaltene Parameter im Drei-Teilchen-Modell

Parameter	η	G	a	$m_2 = m_3 = m_{2,3}$	$d_{13} = d_{23} = d_{13,23}$	D
Wert	1	1	1	1	3	10

Um das Modell auch auf reale Mikropartikel anwenden zu können, wird nun außerdem das Verhältnis zwischen Abstand und Kugelradius auf 3:1 reduziert. Das entspricht eher dem Bild eines eng gepackten Partikelverbundes, wie er in der Realität zum Beispiel bei Mikroplastik vorkommt (vergleiche Mikroskopaufnahmen in [3]). Die physikalische

Folge dieser Maßnahme ist eine höhere hydrodynamische Wechselwirkung. Das sieht man unter anderem an der Gestalt des Oseen-Tensors und seiner $1/r$ -Abhängigkeit. Auch für den Rotne-Prager-Tensor erhöht sich die vermittelte Wechselwirkung, jedoch mit einer entsprechenden Korrektur für kleine Teilchenabstände. Hier wird die Sinnhaftigkeit der Verwendung des Rotne-Prager-Tensors zum Erhalt realitätsnäherer Ergebnisse wieder deutlich. Da Mikroplastik nur schwer deformierbar ist, wird außerdem die Federkonstante auf $D = 10$ erhöht. In Folge dessen variieren die Teilchenabstände generell nur im Bereich von wenigen Prozent, was eine hinreichende Näherung des physikalischen Verhaltens solcher Partikel ist.

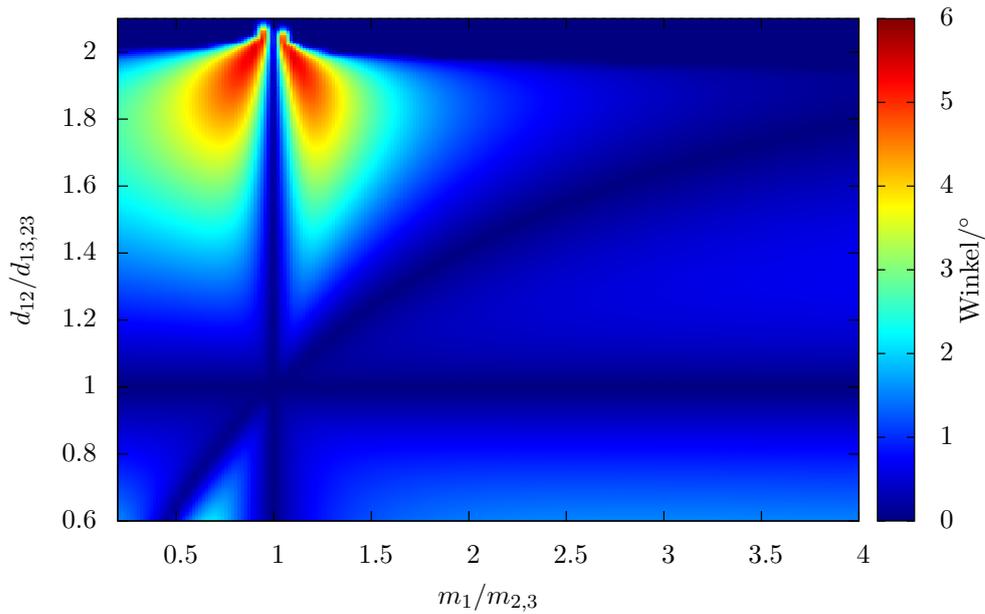


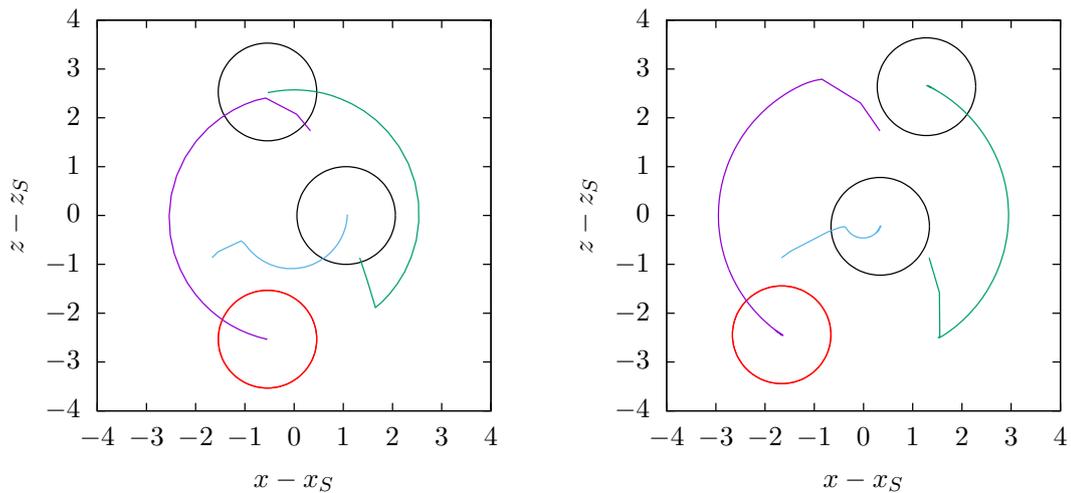
Abbildung 4.9: Farbkodierter Sedimentationswinkel in Abhängigkeit der Asymmetrie durch Massen- und Längenunterschiede von m_1 und d_{12} . Besonders hohe Winkel ergeben sich bei starker Asymmetrie und leichter Inhomogenität (gekennzeichnet durch die roten Bereiche). Senkrechte Sedimentation findet einerseits statt, wenn eine Symmetrieachse existiert (senkrechte bzw. horizontale blaue Linie beim Wert 1). Andererseits gibt es auch eine nichttriviale Kurve, entlang derer der Sedimentationswinkel Null ist.

Um die nötigen Daten zu erhalten, muss die Simulation entsprechend modifiziert werden. Die Berechnung des Sedimentationswinkels erfolgt geometrisch durch die Betrachtung des Geschwindigkeitsvektors gemäß

$$\phi = \arctan \left(\left| \frac{\dot{r}_x}{\dot{r}_z} \right| \right). \quad (4.12)$$

Zur Variation der Parameter werden zwei Schleifen geschrieben, die diese bei jedem Durchlauf abändern und obige Formel zur Berechnung des Winkels heranziehen. Die

4 Sedimentationsverhalten von Mikropartikeln



(a): $m_1/m_{2,3} = 3$; $d_{12}/d_{13,23} \approx 1,65$

(b): $m_1/m_{2,3} = 1,2$; $d_{12}/d_{13,23} \approx 1,93$

Abbildung 4.10: Relative Anordnung der sedimentierenden Kollektive. Obwohl in beiden Fällen keine Symmetrieachse existiert, zeigt sich unterschiedliches Verhalten: (a) sedimentiert senkrecht, (b) dagegen unter einem signifikanten Winkel nach links. Teilchen 1 ist rot markiert.

gesammelten Daten können dann in eine Datei geschrieben und in einer Heatmap (vergleiche Abbildung 4.9) dargestellt werden. Zu beachten ist die Implementierung einer Wartezeit nach jedem Start der Zeitentwicklung, bevor der Winkel ermittelt wird. Denn das Kollektiv braucht eine gewisse Strecke, um sich in die jeweils stabile Lage zu orientieren und dann mit konstantem Winkel zu sedimentieren.

In Abbildung 4.9 fällt zunächst der in dieser Simulation erreichte Winkelbereich von 0 bis ungefähr 6° auf. Damit wäre der Effekt durchaus messbar. Gestützt wird dies durch die Verwendung des Rotne-Prager- statt des Oseen-Tensors. Von einer Überschätzung der Stärke dieser Wechselwirkung und damit des Sedimentationswinkels ist deshalb nicht auszugehen. Auch in realen Experimenten sollte es somit möglich sein, schiefe Sedimentationswinkel nachweisen zu können und dadurch auf die Asymmetrie der Teilchen zu schließen.

Offensichtlich existieren Parameterbereiche, in denen das Kollektiv keine Ablenkung erfährt. Nach den Bemerkungen aus Kapitel 4.2.4 sind dies einerseits die 1-Achsen (das heißt die Geraden in x- und y-Richtung mit dem Wert 1) der relativen Masse und Seitenlänge. Dann besitzt das Teilchen nämlich noch eine Symmetrieachse und sedimentiert senkrecht. Andererseits ist aber eine zweite Kurve zu erkennen, auf der wider Erwarten $\phi = 0$ ist. Hier findet gerade die Auslöschung beider x-Komponenten statt, die durch die Inhomogenität und die Verformung verursacht werden. Betrachtet man nicht nur den

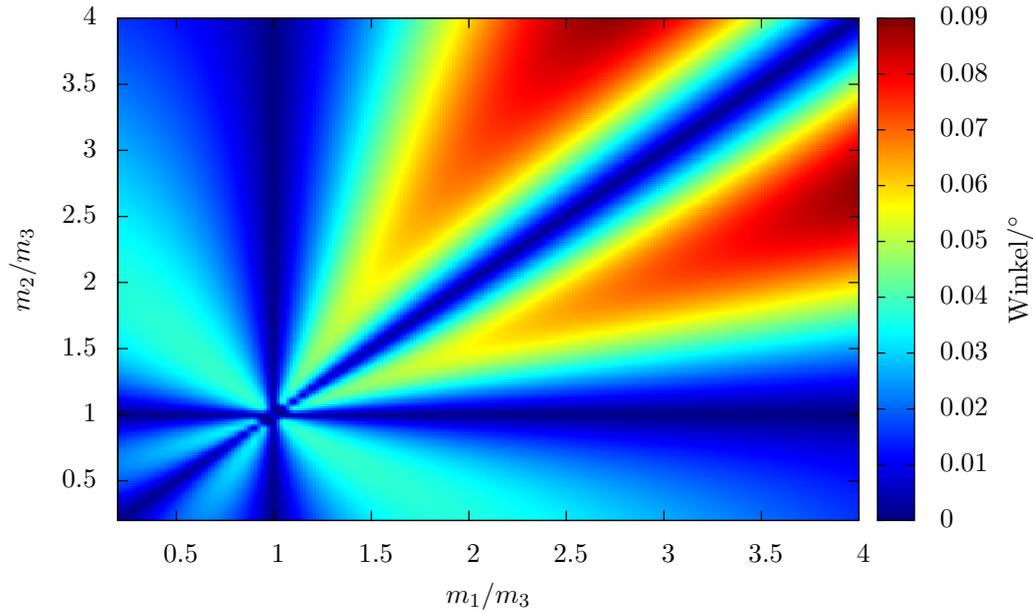


Abbildung 4.11: Sedimentationswinkel bei der Variation von zwei Massen. Die erreichten Sedimentationswinkel sind im Vergleich zu 4.12 sehr klein und steigen mit wachsender Inhomogenität an, wenn keine Symmetrieachse existiert.

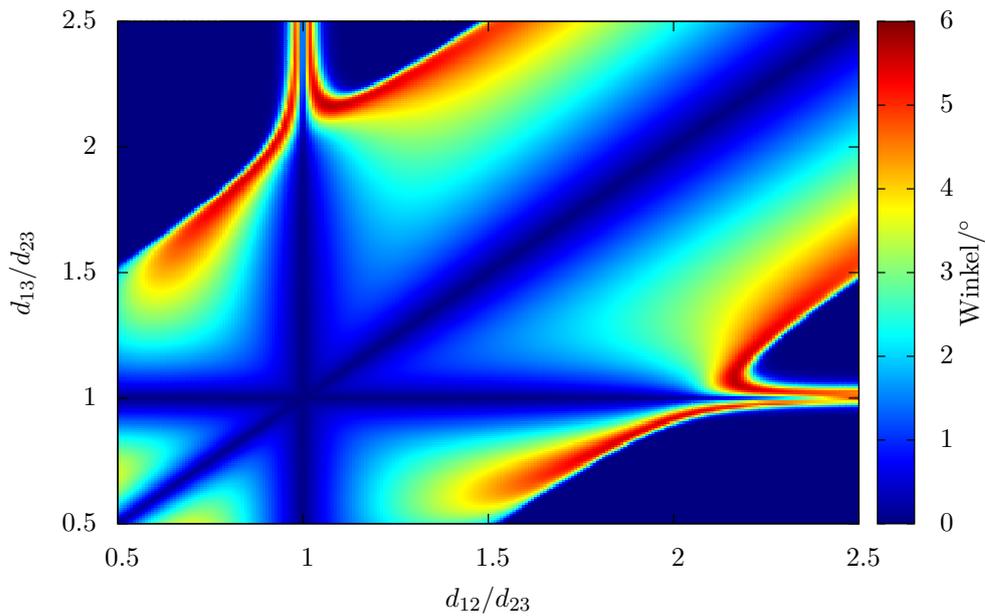


Abbildung 4.12: Sedimentationswinkel bei der Variation von zwei Längen. Die Winkel erreichen deutlich größere Werte als in Abbildung 4.11. Man beachte, dass die Dreiecksungleichung wegen der Deformierbarkeit nicht streng eingehalten werden kann, was den asymptotischen Verlauf nahe der 1-Achsen erklärt. Insgesamt lässt sich folgern, dass die Asymmetrie den wesentlichen Beitrag zum Sedimentationswinkel liefert.

Betrag, sondern noch die Richtung des x-Drifts (positiv oder negativ), ist beim Überschreiten dieser Kurve ein Richtungswechsel zu erkennen. Weiterhin kann die relative Anordnung der Teilchen zueinander betrachtet werden. Es fällt die Ausrichtung einer Kante parallel zur z-Achse auf, wobei das schwere Teilchen nach unten zeigt (vergleiche Abbildung 4.10a).

Für andere Parameter lässt sich dagegen eine schräge Sedimentation realisieren. Besonders groß ist ϕ dabei für sehr längliche Kollektive, die eine leichte Inhomogenität besitzen (vergleiche rote Bereiche in Abbildung 4.9). Die relativen Positionen sind wieder exemplarisch Abbildung 4.10b zu entnehmen. Hier orientieren sich die Teilchen geneigt zur z-Achse mit dem schwersten nach unten an. Die Konstellation erinnert stark an das 2-Teilchen-Problem in Kapitel 4.1.2. Dort wurde ebenfalls festgestellt, dass für einen gewissen Neigungswinkel der Verbindungsachse im Bereich von 45° der Sedimentationswinkel besonders groß ist.

Um festzustellen, ob die Variation der Masse oder der Form den ausschlaggebenden Beitrag zur schiefen Sedimentation liefert, werden jeweils nur Massen (m_1 und m_2) oder Längen (d_{12} und d_{13}) verändert und analog zu oben eine Heatmap erstellt. Die Abbildungen 4.11 und 4.12 zeigen, dass der Hauptanteil der Ablenkung durch die Asymmetrie der Form bedingt ist (man beachte die Skaleneinteilung der Farbcodierung). Somit kann vermutet werden, dass besonders längliche Partikel eine hohe x-Drift aufweisen, wenn sie sich bedingt durch ihre Asymmetrie schräg orientieren.

Hinweise zur Programmgestaltung: Das Erstellen einer Heatmap mit guter Auflösung benötigt relativ viele Parameterpaare, für die die Simulation durchlaufen wird. In Abbildung 4.9 beispielsweise wurde eine Schrittweite von 0,05 in x-Richtung und ungefähr 0,017 in y-Richtung verwendet. Insgesamt musste also für knapp 7000 Wertepaare die Zeitentwicklung der Teilchenpositionen bis zu dem Punkt durchlaufen werden, an dem sie ihre stabile Lage eingenommen haben. Die Rechenzeit hierfür bewegt sich zwar jeweils höchstens im Bereich weniger Sekunden, doch bei einer großen Anzahl an zu untersuchenden Parametern summiert sich diese merklich auf.

Abhilfe schafft eine Parallelisierung der Berechnung, da immer die gleiche Programmsequenz mit lediglich unterschiedlichen Simulationsparametern durchlaufen wird. Die Wertebereiche können auf mehrere *threads* aufgeteilt und simultan abgearbeitet werden. Die Zeitersparnis richtet sich dann nach der Anzahl der verfügbaren CPU-Kerne und erreicht in der Praxis einen Faktor von bis zu 24.¹ Zur Implementierung der Parallelisierung wurde *OpenMP* verwendet, sodass nur wenige Ergänzungen im Quelltext benötigt wurden.

¹Auf dem *btrzx3*-Cluster mit 24 Kernen pro Knoten.

4.2.6 Vergleich der Sedimentationsgeschwindigkeit

In Kapitel 2.5.3 wurde explizit hergeleitet, dass zwei Kugeln in festem Abstand immer schneller sinken als eine einzelne. Insbesondere ist die Sedimentationsgeschwindigkeit abhängig vom Winkel, den die Verbindungsachse mit der Horizontalen einschließt.

Da bei drei wechselwirkenden Teilchen eine Variation der Massen und Form ebenfalls zu einer unterschiedlichen Orientierung führt, ist davon auszugehen, dass das Kollektiv je nach Ausrichtung unterschiedlich schnell sinkt. Analog zu oben wird dieses Verhalten quantitativ dargestellt.

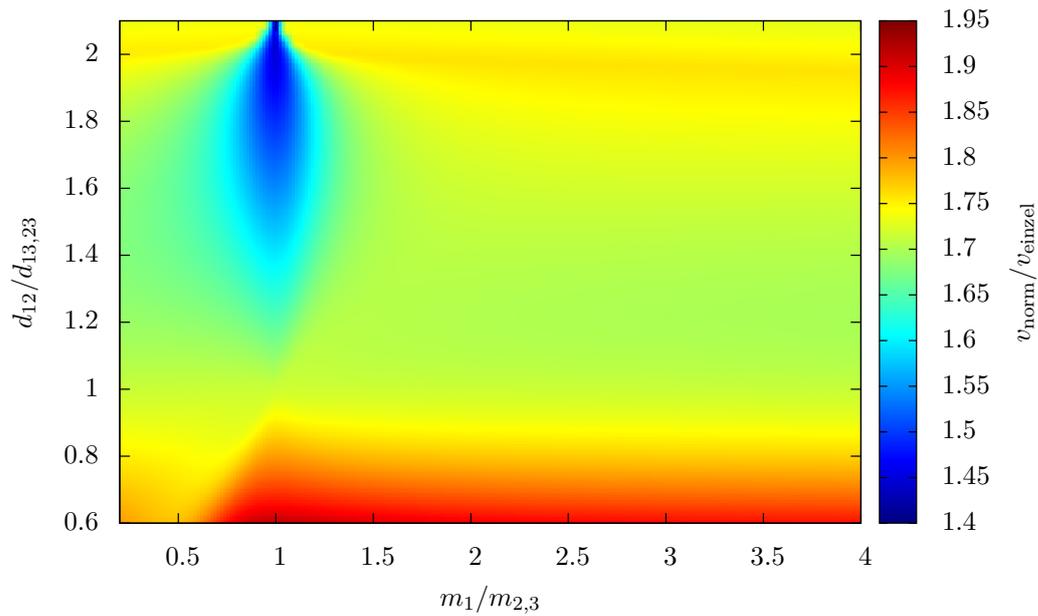


Abbildung 4.13: Massennormierte Sedimentationsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von m_1 und d_{12} im Vergleich mit der eines einzelnen Kügelchens selber Masse. Diese ist durch die hydrodynamische Wechselwirkung immer größer als die des einzelnen Teilchens und erreicht bei dichter Packung besonders hohe Werte (roter Bereich). Etwas niedriger ist die Geschwindigkeit bei starker Asymmetrie (blauer Bereich).

Zu beachten ist allerdings, dass die Daten nicht unmittelbar verglichen werden können, sondern erst eine Normierung bezüglich der Masse vorgenommen werden muss. Denn es ist klar, dass die Wahl eines hohen m_1 das Kollektiv wegen der dadurch größeren Gesamtmasse schneller sinken lässt. Somit ist in Abbildung 4.13 die Größe

$$v_{\text{norm}} = \frac{3m_{2,3}}{m_1 + m_2 + m_3} v_z \quad (4.13)$$

verglichen mit v_{einzel} aufgetragen.

Wie im Fall von zwei Teilchen ist die Sinkrate stets größer als die eines einzelnen (1,4-

bis 1,95-fach im gewählten Parameterbereich), aber variiert mit den Größen m_1 und d_{12} . Auffällig ist der starke Anstieg für kleine Abstände, da dann die hydrodynamische Wechselwirkung besonders groß ist. Ebenfalls markant ist der langsamere Bereich bei länglichen aber einigermaßen homogenen Kollektiven ($m_1/m_{2,3} \approx 1$, $d_{12}/d_{13,23} \approx 1,6 \dots 2$). Dann orientiert sich wie bereits bekannt die lange Seite senkrecht zur z-Achse, was zu einer Minimierung der gegenseitig induzierten Strömung in Sedimentationsrichtung führt.

4.3 Sedimentation eines 4-Teilchen-Modells

Bisher wurden alle Sedimentationsprozesse zur einfacheren Veranschaulichung nur in zwei Dimensionen betrachtet und ein planares Teilchenkollektiv als Modell herangezogen. Das Drei-Teilchen-Modell wird nun in der dritten Dimension durch ein viertes Teilchen erweitert, sodass ein Tetraeder entsteht. Es werden wiederum Modifikationen bezüglich der Homogenität und räumlichen Symmetrie des Kollektivs vorgenommen. Deren Einfluss auf die Sedimentation wird analog zu oben untersucht.

Da das Programm von Grund auf mit drei Ortskoordinaten rechnet und bisher lediglich die y-Komponente konstant auf Null gesetzt wurde, entfällt eine diesbezügliche Implementierung. Die Teilchenpositionen und Wechselwirkungslängen müssen nur richtig initialisiert werden.

4.3.1 Vergleich mit 3-Teilchen-Modell

Mit der Wahl von vier Teilchen hat das Kollektiv nun sechs Verbindungen, die im Allgemeinen alle unterschiedliche Längen besitzen können. Somit herrscht eine größere Freiheit bei der Wahl möglicher Anordnungen, wodurch eine detaillierte Betrachtung aller möglichen Fälle nicht mehr so leicht möglich ist. Zunächst kann aber analog zu oben nur eine Masse bzw. eine Länge verändert und die stabile Sedimentationskonfiguration mit dem zweidimensionalen Fall verglichen werden.

Es zeigt sich, dass alle Fälle aus Kapitel 4.2.4 analog auf den dreidimensionalen Fall übertragen werden können, weshalb auf eine Abbildung verzichtet wird. Ein schwereres Teilchen oder eine kürzere Seite richten sich immer nach unten aus, bei einem leichteren Teilchen oder einer längeren Seite ist es genau umgekehrt.

Auch beim Abändern von zwei Größen wie einer Masse und einer Länge verhält sich das Kollektiv wie oben. Es findet im Allgemeinen eine schräge Sedimentation statt, deren Winkel quantitativ sehr gut mit denen des Drei-Teilchen-Modells übereinstimmt, wie in Abbildung 4.14 zu erkennen ist.

Dennoch kann das Kollektiv bei der Abänderung von zwei Parametern immer noch eine Symmetrieebene besitzen, wie man beispielsweise an der Veränderung einer Masse und

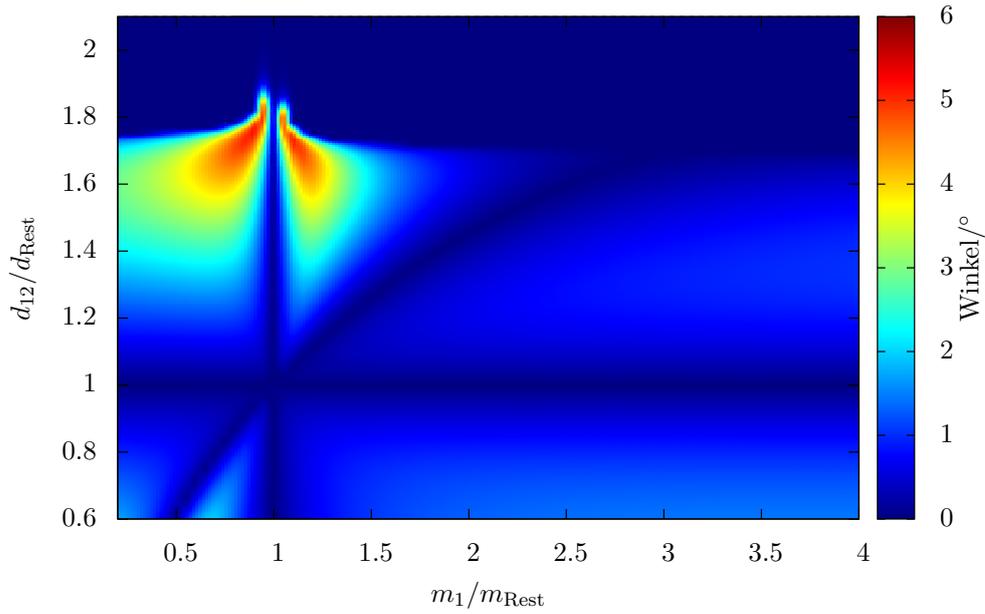


Abbildung 4.14: Sedimentationswinkel des Vier-Teilchen-Modells. Die Ergebnisse haben große Ähnlichkeit zu denen in Abbildung 4.9.

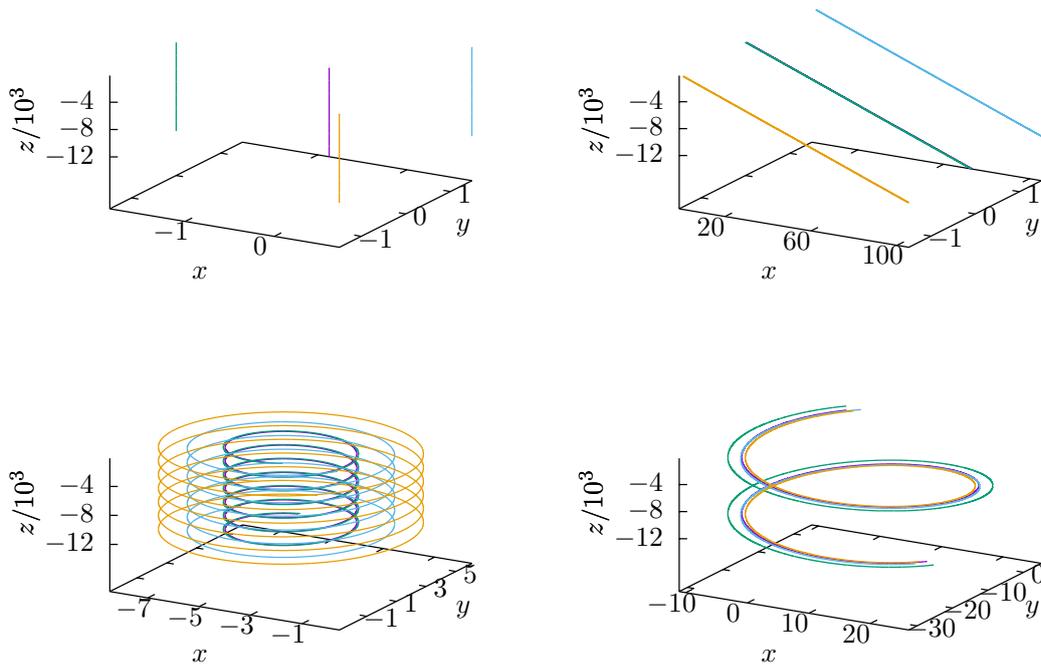


Abbildung 4.15: Mögliche Trajektorien des Vier-Teilchen-Modells bei unterschiedlichen Teilchenparametern. Die (teils entartete) Helixform ist deutlich zu erkennen. Bei den unteren Bildern fällt die Symmetrieebene weg, was die Rotation um die z -Achse verursacht.

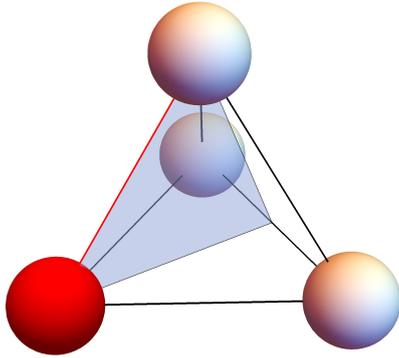


Abbildung 4.16: Bei der Variation von nur zwei Parametern kann noch eine Symmetrieebene existieren. Hier werden exemplarisch die Länge der rot markierten Seite und die Masse des rot markierten Teilchens geändert. Die Symmetrieebene ist blau dargestellt.

einer Seitenlänge in Abbildung 4.16 erkennt. Die Sedimentationsbewegung muss dann parallel zu dieser Ebene verlaufen, da die hydrodynamische Wechselwirkung ebenfalls symmetrisch zu dieser Ebene ist. Mit vier Teilchen und sechs Verbindungen hat man aber die Möglichkeit, die Symmetrie durch die Variation mehrerer Parametern komplett zu brechen. Dann ergeben sich Trajektorien, die nur bei einer dreidimensionalen Modellierung zu beobachten sind. Die möglichen Bewegungsmuster werden im nächsten Kapitel näher erläutert.

4.3.2 Klassifikation stabiler Sedimentationsbewegungen

Durch die systematische Variation der Massen und Verbindungslängen fällt schnell ein Phänomen auf, das in der zweidimensionalen Beschreibung nicht beobachtet werden kann. Die stabile Sedimentationsbewegung des Vier-Teilchen-Modells schließt nämlich eine Rotation um die z-Achse nicht aus. Dies ist nicht mit einem Taumeln des Kollektivs zu verwechseln, da die Gravitationsrichtung im Bezugssystem des Teilchens fest ist. Die Bahn des Partikels beschreibt also immer eine Helix, die bei bestimmten Parametern oder der Existenz von Symmetrien entartet sein kann. Insbesondere sind folgende drei Spezialfälle eingeschlossen:

- Senkrechte Sedimentation ohne Rotation
- Schräge Sedimentation ohne Rotation
- Senkrechte Sedimentation mit Rotation

Der erste Fall tritt insbesondere beim homogenen und symmetrischen Kollektiv auf und wenn nur eine einzige Größe verändert wird. Das Teilchen muss dafür also mehrere Symmetrieebenen besitzen. Eine schräge Sedimentation ohne Rotation ist außerdem immer bei der Existenz von genau einer Symmetrieebene zu beobachten, das heißt oftmals bei der Variation von zwei Parametern. Man beachte, dass beide genannten Fälle auch

bei nichttrivialen Parametern ohne die Existenz von Symmetrieeigenschaften auftreten können.

Der Radius und die Steigung der Helix sind dabei von den gewählten Teilchenparametern abhängig. Exemplarisch sind unterschiedliche Trajektorien in Abbildung 4.15 zu sehen.

4.4 Analytische Betrachtungen für den Spezialfall starrer Körper

Zur konkreten Berechnung der Trajektorien komplexer Körper eignet sich eine numerische Herangehensweise hervorragend, da die zu lösenden Gleichungen gut mit einfachen Algorithmen handhabbar sind. Wie in den letzten Kapiteln gezeigt, können die Partikelbahnen dadurch ermittelt und dargestellt und Klassifikationen bezüglich der Sedimentationsbewegung vorgenommen werden. Bisher interagierten die Teilchenkollektive dabei durch harmonische Wechselwirkungspotentiale miteinander.

Für den Spezialfall komplett starrer Körper lassen sich einige Fragestellungen im Hinblick auf Richtung und Stabilität der Sedimentation auch analytisch nähern. Die folgende Herleitung richtet sich dabei nach Referenz [17], wobei die Betrachtungen von einer homogenen Massenverteilung ausgehen.

4.4.1 Herleitung stationärer Zustände

Zunächst benötigt man einige grundlegende Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik.

$$\dot{\vec{p}} = \vec{F}, \quad \dot{\vec{\pi}} = \vec{\tau}, \quad (4.14)$$

$$\vec{p} = m\vec{v}, \quad \vec{\pi} = \mathbf{C}\vec{\omega}. \quad (4.15)$$

Dabei ist m die Gesamtmasse des Teilchens und \mathbf{C} sein Trägheitstensor, sowie \vec{p} bzw. $\vec{\pi}$ der Impuls und Drehimpuls. \vec{F} ist die auf den Körper wirkende Kraft und $\vec{\tau}$ das Drehmoment. Da bei der Sedimentation nur die Gravitationskraft \vec{g} auf den Körper wirkt, gilt nach Newton

$$\dot{\vec{p}} = \vec{g} + \vec{F}_{\text{HI}}, \quad \dot{\vec{\pi}} = \vec{\tau} + \vec{\tau}_{\text{HI}}. \quad (4.16)$$

Hier ist $\vec{\tau} = 0$, da es sich um einen homogenen Körper handelt und der Massenschwerpunkt mit dem geometrischen Schwerpunkt zusammenfällt. \vec{F}_{HI} und $\vec{\tau}_{\text{HI}}$ beschreiben die Kraft und das Drehmoment, welche durch die hydrodynamischen Eigenschaften des Körpers hervorgerufen werden könnten. Wegen der Linearität der Stokes-Gleichung kann angenommen werden, dass diese ebenfalls linear von der Geschwindigkeit \vec{v} und der Win-

4 Sedimentationsverhalten von Mikropartikeln

kelgeschwindigkeit $\vec{\omega}$ abhängen, was den Ansatz

$$\vec{F}_{\text{HI}} = -\mathbf{L}_1\vec{v} - \mathbf{L}_2\vec{\omega}, \quad \vec{\tau}_{\text{HI}} = -\mathbf{L}_3\vec{v} - \mathbf{L}_4\vec{\omega} \quad (4.17)$$

rechtfertigt. Damit erhält man die Bewegungsgleichungen

$$\dot{\vec{g}} = 0, \quad (4.18)$$

$$\dot{\vec{p}} = -\mathbf{L}_1\vec{v} - \mathbf{L}_2\vec{\omega} + \vec{g}, \quad (4.19)$$

$$\dot{\vec{\pi}} = -\mathbf{L}_3\vec{v} - \mathbf{L}_4\vec{\omega}. \quad (4.20)$$

Bisher wurden die Vektoren im Laborsystem mit der Orthonormalbasis $\{\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3\}$ betrachtet. Eine zweite Basis $\{\hat{b}_1, \hat{b}_2, \hat{b}_3\}$ soll fest am Körper fixiert sein. Alle Vektoren können auch in dieser Basis ausgedrückt werden, was im Folgenden durch einen Unterstrich ($\vec{r} \rightarrow \underline{r}$) kenntlich gemacht wird. Aus der bekannten Transformationsvorschrift

$$(\partial_t)_{\text{Labor}} = (\partial_t)_{\text{Körper}} + \underline{\omega} \times \quad (4.21)$$

in das rotierende Bezugssystem des Körpers folgt

$$\dot{\underline{g}} + \underline{\omega} \times \underline{g} = 0, \quad (4.22)$$

$$\dot{\underline{p}} + \underline{\omega} \times \underline{p} = -\mathbf{L}_1\underline{v} - \mathbf{L}_2\underline{\omega} + \underline{g}, \quad (4.23)$$

$$\dot{\underline{\pi}} + \underline{\omega} \times \underline{\pi} = -\mathbf{L}_3\underline{v} - \mathbf{L}_4\underline{\omega}. \quad (4.24)$$

Die Transformation hat den Vorteil, dass \mathbf{L}_i ($i = 1; 2; 3; 4$) dann konstant ist, da der Körper nicht deformierbar sein soll. Insgesamt lässt sich die für das Teilchen spezifische *Widerstandsmatrix*

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_3 \\ \mathbf{L}_2 & \mathbf{L}_4 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

definieren. Eine explizite Bestimmung ist jedoch nur für spezielle Geometrien möglich, zum Beispiel wenn man den Körper mit Kugeln modelliert. Man beachte, dass \mathbf{L} eine 6×6 -Matrix ist, da der Körper im Schwerpunktsystem drei translatorische und drei rotatorische Freiheitsgrade besitzt. Durch (4.17) wird auch klar, welche Bedeutung die einzelnen Blöcke von \mathbf{L} haben. \mathbf{L}_1 beschreibt den translatorischen Widerstand des Teilchens; \mathbf{L}_4 den rotatorischen. Die Matrizen \mathbf{L}_2 und \mathbf{L}_3 sorgen für eine Kopplung zwischen der Translation und der Rotation des Körpers. Die Kenntnis dieser Kopplung ermöglicht fundamentale Aussagen über die Art der Sedimentationsbewegung [5].

Weiterhin existiert die inverse Matrix von \mathbf{L} [18] und wird durch

$$\mathbf{M} = \mathbf{L}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_3 \\ \mathbf{M}_2 & \mathbf{M}_4 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

4.4 Analytische Betrachtungen für den Spezialfall starrer Körper

definiert. Sie beschreibt anschaulich die hydrodynamische Mobilität des Partikels.

Das Ziel ist, \mathbf{M} für ein durch fest verbundene Kugeln modelliertes Teilchen zu finden. Denn gerade \mathbf{M}_1 und \mathbf{M}_2 geben Aufschluss über die Richtung und die Orientierung einer stationären Sedimentation.

So kann nämlich durch störungstheoretische Ansätze zu den Bewegungsgleichungen (4.22) bis (4.24) die Lösung

$$\underline{p}(t) = \exp(-\mathbf{A}t) \left(\underline{p}_0 - m\mathbf{M}_1\underline{g}_0 \right) + m\mathbf{M}_1\underline{g}(t), \quad (4.27)$$

$$\underline{\pi}(t) = \exp(-\mathbf{A}t) \left(\underline{\pi}_0 - m\mathbf{M}_2\underline{g}_0 \right) + \mathbf{C}\mathbf{M}_2\underline{g}(t) \quad (4.28)$$

mit einer positiv definiten Matrix \mathbf{A} gefunden werden. Die Bewegung des Kraftvektors im Schwerpunktsystem muss dabei

$$\dot{\underline{g}} = \underline{g} \times \mathbf{M}_2\underline{g}, \quad \underline{g}(0) = \underline{g}_0 \quad (4.29)$$

erfüllen. Für eine genaue Herleitung sei auf Referenz [17] verwiesen.

Betrachtet man die Lösungen für Impuls und Drehimpuls, so fällt auf, dass der erste Summand jeweils exponentiell mit der Zeit abfällt. Ausgehend davon kann also eine Bedingung für eine stationäre Sedimentation definiert werden. Diese ist genau dann erreicht, wenn

$$\underline{p} = m\mathbf{M}_1\underline{g} \quad \Leftrightarrow \quad \underline{v} = \mathbf{M}_1\underline{g}, \quad (4.30)$$

$$\underline{\pi} = \mathbf{C}\mathbf{M}_2\underline{g} \quad \Leftrightarrow \quad \underline{\omega} = \mathbf{M}_2\underline{g}, \quad (4.31)$$

$$0 = \underline{g} \times \mathbf{M}_2\underline{g} \quad (4.32)$$

gilt. Besonders durch die letzte Gleichung wird deutlich, dass \mathbf{M}_2 maßgeblich die möglichen stationären Konfigurationen vorgibt, da diese auf das Eigenwertproblem

$$\mathbf{M}_2\underline{g} = \lambda\underline{g}, \quad \lambda \in \mathbb{R} \quad (4.33)$$

führt. Da \mathbf{M}_2 eine 3×3 -Matrix ist, existiert immer mindestens ein reeller Eigenwert und damit immer mindestens eine stationäre Sedimentationskonfiguration. Dann ist \underline{g} im Schwerpunktsystem außerdem konstant, was eine gewisse Orientierung des Teilchens vorgibt. Die einzig verbleibende Rotation kann nur um die feste Gravitationsrichtung erfolgen. Symbolisch lässt sich nun jeder stationäre Zustand als Tupel

$$(\underline{g}, \underline{v}, \underline{\omega}) = (\underline{g}, \mathbf{M}_1\underline{g}, \lambda\underline{g}) \quad (4.34)$$

notieren, nachdem das Eigenwertproblem (4.33) gelöst wurde.

4.4.2 Verallgemeinerung auf inhomogene Partikel

Dass diese Herleitung auch direkt auf inhomogene Partikel erweitert werden kann, wird im Folgenden skizziert. Bei Teilchen mit ungleicher Massenverteilung liegen der Massenschwerpunkt und der geometrische Schwerpunkt um einen Vektor $\vec{\delta}$ versetzt. Dann ist in Gleichung (4.16) auch das Drehmoment

$$\vec{\tau} = \vec{\delta} \times \vec{g} \neq 0. \quad (4.35)$$

Dieses geht entsprechend in die Bewegungsgleichungen (4.22) bis (4.24) ein, wobei für eine genauere Herleitung wieder auf Referenz [17] verwiesen sei. Dann können schlussendlich analoge Lösungen zu diesen Bewegungsgleichungen gefunden werden, wobei die Tensoren \mathbf{M}_1 und \mathbf{M}_2 durch

$$\mathbf{D}_1 = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_3(\underline{\delta} \times) \quad \text{und} \quad \mathbf{D}_2 = \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_4(\underline{\delta} \times) \quad (4.36)$$

ersetzt werden.² Sämtliche folgenden Ergebnisse gelten dann weiterhin mit \mathbf{D}_1 und \mathbf{D}_2 anstelle von \mathbf{M}_1 und \mathbf{M}_2 .

4.4.3 Klassifikation stationärer Sedimentationsbewegungen

Die in Kapitel 4.3.2 gefundenen stabilen Sedimentationsbewegungen können nun auch analytisch begründet werden. Im allgemeinen Fall inhomogener Partikel charakterisiert das Tupel

$$(\underline{g}, \underline{v}, \underline{\omega}) = (\underline{g}, \mathbf{D}_1 \underline{g}, \lambda \underline{g}) \quad (4.37)$$

den stationären Zustand, wobei λ und \underline{g} durch das Eigenwertproblem

$$\mathbf{D}_2 \underline{g} = \lambda \underline{g} \quad (4.38)$$

ermittelt werden müssen. Anhand des Eigenwertes λ können zwei Fälle unterschieden werden:

- $\lambda = 0 \Rightarrow \underline{\omega} = 0$: Keine Rotation um die z-Achse
- $\lambda \neq 0 \Rightarrow |\underline{\omega}| > 0$: Rotation um die z-Achse

Mit dem entsprechenden Eigenvektor \underline{g} lässt sich dann auch die Geschwindigkeit durch $\underline{v} = \mathbf{D}_1 \underline{g}$ berechnen. Hier treten ebenfalls zwei Fälle auf:

²Hierbei wird das Kreuzprodukt als die lineare Abbildung identifiziert, sodass gilt:

$$(\underline{\delta} \times) = \begin{pmatrix} 0 & -d_3 & d_2 \\ d_3 & 0 & -d_1 \\ -d_2 & d_1 & 0 \end{pmatrix}$$

- $\underline{v} \parallel \underline{g}$: Senkrechte Sedimentation
- $\underline{v} \not\parallel \underline{g}$: Schräge Sedimentation

Insgesamt führt die analytische Betrachtung also wieder auf das bereits bekannte Ergebnis einer helikalen Bahn, bzw. einen Spezialfall dieser. Das Vorzeichen von λ gibt Auskunft über die Windungsrichtung.

Hier ist anzumerken, dass bisher keine Aussagen über die Stabilität der Sedimentationsbewegung gemacht wurde. Mit der obigen Herleitung ist lediglich bekannt, dass stationäre Konfigurationen existieren. Insbesondere verbleiben nach der Berechnung von \underline{g} noch zwei komplementäre Orientierungen, da \underline{g} lediglich die Sedimentationsachse, nicht aber die Richtung vorgibt. Mithilfe von Lyapunov-Funktionen kann gezeigt werden, dass immer mindestens eine davon stabil ist [17]. Dies würde aber den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Bei hinreichender Inhomogenität, also einer signifikanten Trennung von Massenschwerpunkt und geometrischem Schwerpunkt, kann außerdem bewiesen werden, dass es genau eine stabile Orientierung gibt, wobei sich der Massenschwerpunkt nach unten orientiert [19].

4.4.4 Anwendung auf Kugel-Modell

Dem bisherigen Modell bei der numerischen Betrachtung lag die Gleichung

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{u}_i = \sum_{j=1}^N \mathbf{H}_{ij} \vec{F}_j \quad (4.39)$$

zugrunde, wobei \mathbf{H}_{ij} die jeweilige Mobilitätsmatrix zwischen Teilchen i und j darstellt. Da diese nur von den Relativkoordinaten zwischen zwei Teilchen abhängt, kann wieder in die körperfeste Basis gewechselt und

$$\underline{u} = \mathbf{H} \underline{F} \quad (4.40)$$

geschrieben werden, sodass \mathbf{H} eine $3N \times 3N$ -Matrix bzw. \underline{u} und \underline{F} $3N$ -dimensionale Vektoren sind. Nun wird die Matrix $\mathbf{A} = \mathbf{H}^{-1}$ eingeführt, sodass

$$\underline{F} = -\mathbf{A} \underline{u} \quad \Leftrightarrow \quad \underline{F}_i = -\sum_{j=1}^N \mathbf{A}_{ij} \underline{u}_j \quad (4.41)$$

gilt. Dabei besteht \mathbf{A} wiederum aus 3×3 -Blöcken \mathbf{A}_{ij} . Außerdem kann die Kraft und das Drehmoment mit

$$\underline{F} = \sum_{j=1}^N \underline{F}_j \quad \underline{\tau} = \sum_{j=1}^N \underline{r}_j \times \underline{F}_j \quad (4.42)$$

4 Sedimentationsverhalten von Mikropartikeln

klassisch berechnet werden. Eine Transformation ins Schwerpunktsystem liefert für die Geschwindigkeiten der jeweiligen Teilchen

$$\underline{u}_j = \underline{v} + \underline{\omega} \times \underline{r}_j. \quad (4.43)$$

Setzt man diesen Zusammenhang in (4.41), und das Ergebnis in (4.42) ein, erhält man wieder die bekannte Form

$$\underline{F} = -\mathbf{L}_1 \underline{v} - \mathbf{L}_2 \underline{\omega}, \quad \underline{\tau} = -\mathbf{L}_3 \underline{v} - \mathbf{L}_4 \underline{\omega}. \quad (4.44)$$

mit den Ausdrücken

$$\mathbf{L}_1 = \sum_{i,j=1}^N \mathbf{A}_{ij}, \quad \mathbf{L}_3 = \sum_{i,j=1}^N \mathbf{A}_{ij} (\underline{r}_j \times)^T, \quad (4.45)$$

$$\mathbf{L}_2 = \sum_{i,j=1}^N (\underline{r}_i \times) \mathbf{A}_{ij}, \quad \mathbf{L}_4 = \sum_{i,j=1}^N (\underline{r}_i \times) \mathbf{A}_{ij} (\underline{r}_j \times)^T \quad (4.46)$$

für die Blockmatrizen von \mathbf{L} . Im letzten Schritt muss nur noch \mathbf{L} invertiert werden, um \mathbf{M} zu erhalten, woraus gegebenenfalls auch \mathbf{D} folgt. Insgesamt lässt sich also von der einfach bestimmbaren Mobilitätsmatrix \mathbf{H} auf \mathbf{M}_1 und \mathbf{M}_2 bzw. \mathbf{D}_1 und \mathbf{D}_2 schließen. Man beachte, dass bei der Berechnung von \mathbf{H} immer noch die Näherung der verwendeten hydrodynamischen Interaktion (Oseen- oder Rotne-Prager-Tensor) besteht, weshalb die physikalische Genauigkeit auch hier davon abhängt. Man kann sich dadurch aber die numerische Zeitentwicklung sparen, wenn die Annahme eines komplett starren Teilchens gerechtfertigt ist. Dies resultiert in einer viel schnelleren Berechnung.

4.4.5 Ergebnisse und Grenzen der analytischen Betrachtung

Alle bisherigen Ergebnisse beruhen auf dem Verbot einer Deformation des Partikels. Dass dies Einschränkungen bezüglich der Anwendbarkeit des analytischen Modells mit sich bringt, soll im Folgenden gezeigt werden. Dazu kann man beispielsweise die bereits bekannten Ergebnisse aus Kapitel 4.2.1 heranziehen, in dem das Verhalten eines homogenen und symmetrischen 3-Teilchen-Modells betrachtet wurde. Dieses orientiert sich immer mit einer Spitze nach unten, wobei die Auswahl nur durch die Anfangsbedingungen erfolgt, da alle Teilchen gleichberechtigt sind. Dieses Ergebnis kann mit obiger Rechnung nicht erklärt werden. Man betrachte dazu wieder

$$\mathbf{M}_2 \underline{g} = \lambda \underline{g}. \quad (4.47)$$

Durch Symmetrieüberlegungen kann dieses Eigenwertproblem auch ohne die explizite

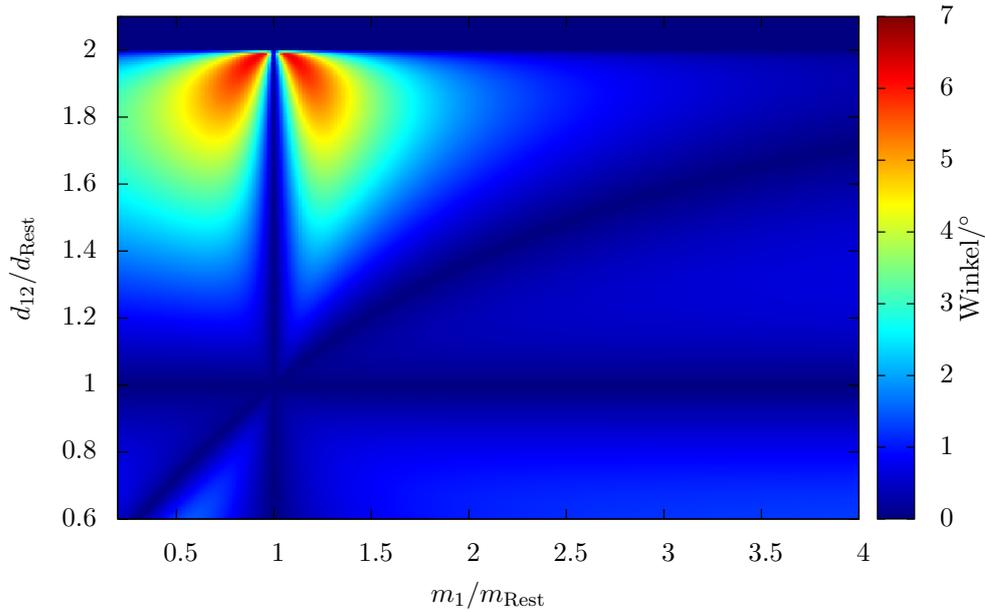


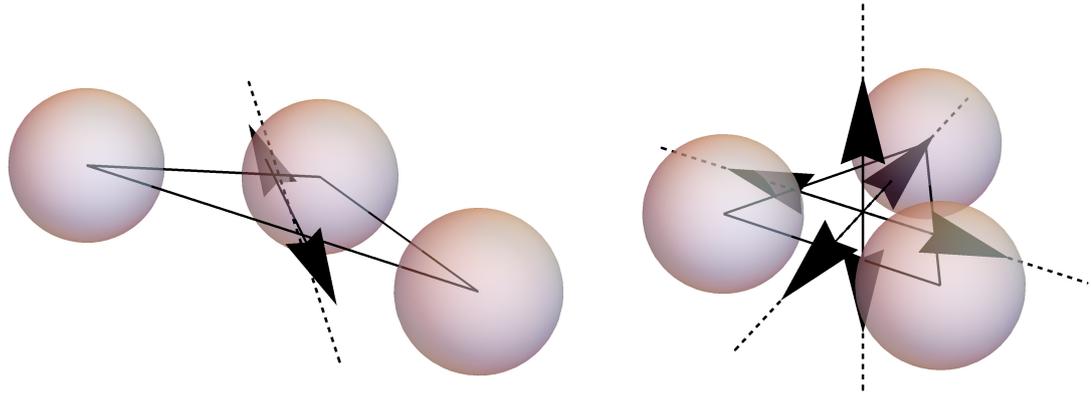
Abbildung 4.17: Mit dem analytischen Modell berechnete Sedimentationswinkel eines starren Drei-Teilchen-Kollektivs bei der Variation einer Masse und einer Seitenlänge. Die erhaltenen Sedimentationswinkel stimmen sehr gut mit den numerisch berechneten in Abbildung 4.9 überein, insbesondere auch die Lage der Extrema und Nulllinien. Durch die scharfe Kante bei d_{12}/d_{Rest} fällt auf, dass die Dreiecksungleichung exakt eingehalten werden muss, da das Kollektiv nicht mehr deformierbar ist.

Kenntnis von \mathbf{M}_2 gelöst werden.

Da es sich um eine 3×3 -Matrix handelt, muss es insgesamt drei Eigenwerte geben. Das Kollektiv aus drei Teilchen ist planar und spannt somit eine Ebene auf. Es ist klar, dass eine Bewegung senkrecht zu dieser Ebene wegen der Symmetrie stationär sein muss. Ein Eigenvektor zeigt also in die entsprechende Richtung, wodurch noch zwei weitere Eigenvektoren verbleiben. Jedoch ist es nicht möglich, diese so anzuordnen, dass sie invariant bezüglich einer Drehung um 120° sind. Diese Bedingung wird aber durch die drei identischen Teilchen vorgegeben, da keines bevorzugt werden darf.

Die Lösung des Problems ist ein entarteter Eigenwert mit Vektoren, die den Eigenraum \mathbb{R}^3 aufspannen. Das Ergebnis wird auch nach einer expliziten Berechnung mit *Mathematica* erhalten. Jedes \underline{g} , welches in diesem Eigenraum liegt, führt zu einer stationären Sedimentation. Insbesondere gibt es keine eindeutige Achse mehr, die die Orientierung vorgibt.

Gerade dieses Verhalten wird aber in Kapitel 4.2.1 widerlegt. Das analytische Modell versagt also bei Anordnungen, deren Symmetrie erst durch die Deformierbarkeit gebrochen wird. Diese Problematik wird in Abbildung 4.18 deutlich, die den Einfluss von



(a): $m_1 = 1,2m_{2,3}$, $d_{12} = 1,8d_{13,23}$

(b): homogen und symmetrisch

Abbildung 4.18: Mit Mathematica berechnete stabile Sedimentationsrichtungen exemplarischer Drei-Teilchen-Kollektive. Die gestrichelten Linien deuten die Richtung von \underline{g} an, damit der Verbund stabil sedimentiert. Die dann durch $\mathbf{D}_1 \underline{g}$ gegebene einsetzende Bewegung verläuft in Richtung der Pfeile. Man erkennt, dass diese Methode für hinreichend inhomogene und asymmetrische Kollektive wie in (a) sehr gut mit den numerischen Ergebnissen von oben übereinstimmt und in dem Fall eine schräge Sedimentationsbewegung zu beobachten ist. In (b) ist der Teilchenverbund homogen und symmetrisch, sodass sich nach der analytischen Rechnung der entartete Eigenraum \mathbb{R}^3 ergibt und es keine Vorzugsrichtung geben sollte. Die Deformierbarkeit macht dieses Ergebnis jedoch zunichte.

Deformierbarkeit auf die Anwendbarkeit der analytischen Rechnung veranschaulicht. Dennoch lassen sich viele numerisch erhaltene Aussagen auch durch die analytische Rechnung prüfen. In guter Übereinstimmung sind dabei zum Beispiel die Sedimentationswinkel (vergleiche Abbildung 4.17) und Teilchenorientierungen, die durch den geringeren Aufwand der Matrizenrechnung viel schneller erhalten werden können als mit einer schrittweisen numerischen Integration der Geschwindigkeiten der einzelnen Teilchen. Es ist jedoch zu beachten, dass eine effiziente exakte Lösung oftmals an Schritten wie der Matrixinversion oder dem Eigenwertproblem scheitert. Zumindest in Mathematica ist es daher meist ratsam, diese Schritte numerisch durchzuführen. Allerdings ist der Präzisionsverlust dadurch marginal und insbesondere viel kleiner als durch die Zeitentwicklung mithilfe des Euler- oder Runge-Kutta-Algorithmus.

In dieser Arbeit wurde sich sowohl numerisch als auch analytisch nur mit sehr einfachen Modellen aus wenigen verbundenen Kugeln auseinandergesetzt. Dies steht in klarem Kontrast zu Referenz [17], in der Ketten aus mehreren hundert Kugeln nachgebildet wurden und deren Sedimentationsdynamik mithilfe des selben analytischen Vorgehens berechnet wurde. Es zeigt sich allerdings, dass auch mit der Einschränkung auf wenige Kugeln sinnvolle Ergebnisse erhalten werden. Insbesondere die wesentlichen Aussagen

4.4 Analytische Betrachtungen für den Spezialfall starrer Körper

über die Abhängigkeit der Sedimentationsbewegung von Symmetrieeigenschaften des untersuchten Teilchens lassen sich so einfach nachvollziehen. Für etwaige Experimente können daher auch die Ergebnisse der analytischen Auswertung dieser Arbeit relevant sein. Denn für reale Mikropartikel reicht es demnach aus, sie durch wenige verbundene Kugeln zu modellieren, welche die wichtigsten Eigenschaften des Mikroteilchens wie Packungsdichte, Asymmetrie und Inhomogenität gut nachbilden. Dies erleichtert den Vergleich zwischen theoretischem Modell und empirischen Befunden enorm.

5 Fazit und Ausblick

Dass selbst vermeintlich einfache Fragestellungen in der Mikrofluidik zu interessanten Beobachtungen führen können, zeigt sich auch in dieser Arbeit anhand der Untersuchung von Sedimentationsbewegungen unterschiedlicher Mikropartikel. Dazu wurden zunächst die nötigen physikalischen Grundlagen erarbeitet, um die Trajektorien eines Teilchenmodells, das aus wechselwirkenden Kugeln aufgebaut ist, numerisch zu ermitteln. Wichtig war dabei die sogenannte hydrodynamische Wechselwirkung, die aus der Stokes-Gleichung hervorging. So wurde schließlich ein Programm geschrieben, das die Bewegung solcher Teilchen simulieren konnte, was zunächst an analytisch bekannten Ergebnissen getestet wurde.

Zur Vereinfachung wurde sich bei den numerischen Betrachtungen erst auf zwei Raumdimensionen beschränkt und ein Drei-Teilchen-Modell herangezogen. Eine wesentliche Beobachtung nach der Variation der Teilchenparameter war der Einfluss der Existenz einer ausgeprägten Symmetrieachse. Ist jene vorhanden, so sedimentiert das Kollektiv senkrecht, nachdem es sich mit der Symmetrieachse parallel zur Senkrechten orientiert hat. Hier wurde eine Übersicht der möglichen stabilen Orientierungen erstellt. Ohne Symmetrieachse driftet das Teilchen zur Seite, wobei im betrachteten Fall Sedimentationswinkel von bis zu 6° beobachtet werden konnten. Der Einfluss der Deformierbarkeit konnte insbesondere am homogenen und symmetrischen Drei-Teilchen-Kollektiv nachvollzogen werden, da sich dieses nach einem Transienten vorzugsweise mit einer Spitze nach unten orientiert, was bei starren Verbindungen nicht der Fall wäre.

In Anbetracht realitätsnäherer Ergebnisse wurde dann das System auf drei Raumdimensionen erweitert und ein deformierbares Vier-Teilchen-Kollektiv in tetraedrischer Anordnung untersucht. Ausgehend von vorherigen Erkenntnissen war wiederum ein wesentlicher Einfluss der vorliegenden Symmetrieeigenschaften zu erwarten. Es zeigte sich, dass die allgemeinste Sedimentationsbewegung immer einer Helix entspricht. Insbesondere ist deshalb eine Rotation um die Senkrechte zu erwarten. Gibt es eine Symmetrieebene, so entartet die Helix zu einer schrägen Geraden. Existieren noch weitere Symmetrien, findet eine senkrechte Sedimentation statt, wobei es wiederum eine Vorzugsorientierung gibt, die beim homogenen Tetraeder analog zu oben auf der Deformierbarkeit beruht.

Abschließend wurde gezeigt, dass sich die numerisch ermittelten Bewegungsmuster auch analytisch herleiten lassen, sofern man die Deformierbarkeit vernachlässigen kann. Da-

bei wurde sich auf bekannte Ergebnisse und Konventionen bezogen [5, 17, 19]. Weiterhin konnte daraus eine analytische Rechnung hergeleitet werden, mit der stabile Sedimentationsbewegungen der oben betrachteten Kugelmodelle erhalten werden können. Diese Methode erspart die Implementierung einer numerischen Zeitentwicklung zur Simulation der Teilchentrajektorien und ist somit wesentlich effizienter. Oftmals zeigte sich, dass die Vernachlässigung der Deformierbarkeit eine hinreichende Näherung ist, insbesondere bei stark asymmetrischen oder inhomogenen Partikeln. Dennoch existieren auch Fälle, in denen die Deformierbarkeit wesentlich zur Orientierung der Teilchen beiträgt, was die Voraussetzungen der analytischen Betrachtung bricht.

Ausgehend von den Ergebnissen dieser Arbeit liegen viele weitere Fragestellungen nahe. Da lediglich sehr einfache Teilchenmodelle herangezogen wurden, könnte der nächste Schritt die Untersuchung komplexerer Kollektive sein. Mit der oben genannten analytischen Methode wurde beispielsweise schon die Sedimentation von DNA-Filamenten untersucht, die jedoch als starr angenommen wurden [17]. Auch numerisch können komplexere Modelle simuliert werden, was zusätzlichen Aufschluss über die Konsequenzen der Deformierbarkeit gibt.

Ein weiterer Aspekt ist die Betrachtung der Sedimentation in einem externen Fluss, der beispielsweise ein Poiseuille-Profil aufweist. Es ist bereits bekannt, dass bestimmte deformierbare Teilchen mit der Zeit zum Zentrum einer Poiseuille-Strömung driften [20]. Mit einer zusätzlichen Gravitationskraft und eventuellen Asymmetrien und Inhomogenitäten könnte diese Bewegung signifikant beeinflusst werden. Von Bedeutung wäre dieses Verhalten zum Beispiel bei verschmutzten Flüssigkeiten, die durch kleine Kanäle oder Poren abfließen.

Zuletzt könnten oben genannte Erkenntnisse auch zu einer Selektionsmethode von unterschiedlichen Teilchengemetrien dienen. Da die Sedimentationsbewegung stark von den Symmetrieeigenschaften des betreffenden Partikels abhängt, landen unterschiedliche Teilchenarten im Allgemeinen an unterschiedlichen Orten. Besonders stark asymmetrische Partikel könnten dank des signifikanten Sedimentationswinkels somit leicht von symmetrischen Teilchen getrennt werden. Diese Methode könnte auch zu einer Analyse der in einer Flüssigkeit suspendierten Teilchen dienen und eventuell helfen, Schmutzpartikel zu entfernen. Nicht zuletzt wäre dies auch im Rahmen der Meeresforschung ein wichtiger Schritt, der Verschmutzung durch Mikroplastik [3] entgegenzuwirken.

Literatur

- [1] C. L. Fefferman: „Existence and Smoothness of the Navier-Stokes Equation“. Official Problem Description. Clay Mathematics Institute, 2000. URL: <http://www.claymath.org/sites/default/files/navierstokes.pdf> (besucht am 07.06.2017).
- [2] A. Satho: *Introduction to Molecular-Microsimulation for Colloidal Dispersions*. 1. Aufl. Bd. 17. Elsevier, 2003. ISBN: 978-0-444-51424-0.
- [3] N. Kowalski, A. M. Reichardt, J. J. Waniek: „Sinking rates of microplastics and potential implications of their alteration by physical, biological, and chemical factors“. In: *Marine Pollution Bulletin* 109 (2016), S. 310–319. DOI: 10.1016/j.marpolbul.2016.05.064.
- [4] W. Zimmermann, A. Peeters: *Mechanics of Continua*. Vorlesungsskript. Bayreuth, 2016.
- [5] J. Happel, H. Brenner: *Low Reynolds Number Hydrodynamics*. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1983. ISBN: 978-9-024-72877-0.
- [6] G. P. Merker, C. Baumgarten: *Fluid- und Wärmetransport Strömungslehre*. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2000. ISBN: 978-3-519-06385-8.
- [7] L. D. Landau, E. M. Lifschitz: *Lehrbuch der Theoretischen Physik. Hydrodynamik*. Hrsg. von W. Weller. 5. Aufl. Bd. 6. Nourney: Verlag Europa-Lehrmittel, 1991. ISBN: 978-3-808-55554-5.
- [8] M. Bartelmann u. a.: *Theoretische Physik*. 1. Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer Spektrum, 2015. ISBN: 978-3-642-54617-4.
- [9] H. Lesch, G. T. Birk, H. Zohm: *Theoretische Hydrodynamik*. Vorlesungsskript. München, 2007. URL: http://www.physik.lmu.de/lehre/vorlesungen/wise_07_08/TVI_hd/vorlesung/skript.pdf (besucht am 17.05.2017).
- [10] E. Schmutzer: *Grundlagen der Theoretischen Physik*. 3. Aufl. Bd. 1. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005. ISBN: 978-3-527-40555-8.
- [11] M. Lisicki: *Four approaches to hydrodynamic Green's functions - the Oseen tensors*. 2013. arXiv: 1312.6231.

- [12] W. H. Press u. a.: *Numerical Recipes*. 3. Aufl. New York: Cambridge University Press, 2007. ISBN: 978-0-521-88068-8.
- [13] J. Frank: *Numerical Modelling of Dynamical Systems*. Amsterdam, 2008. Kap. 10. URL: <http://www.staff.science.uu.nl/~frank011/Classes/numwisk> (besucht am 03.07.2017).
- [14] M. Reichert: „Hydrodynamic Interactions in Colloidal and Biological Systems“. Dissertation. Universität Konstanz, 2006. URL: http://kops.uni-konstanz.de/bitstream/handle/123456789/9458/Reichert_Diss.pdf (besucht am 31.05.2017).
- [15] J. Rotne, S. Prager: „Variational Treatment of Hydrodynamic Interaction in Polymers“. In: *The Journal of Chemical Physics* 50.11 (1969), S. 4831–4837. DOI: 10.1063/1.1670977.
- [16] L. Li u. a.: „The sedimentation of flexible filaments“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 735 (2013), S. 705–736. DOI: 10.1017/jfm.2013.512.
- [17] O. Gonzalez, A. B. A. Graf, J. H. Maddocks: „Dynamics of a rigid body in a Stokes fluid“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 519 (2004), S. 133–160. DOI: 10.1017/S0022112004001284.
- [18] M. Bebendorf: *Angewandte Funktionalanalysis*. Vorlesungsskript. Bayreuth, 2017.
- [19] H. F. Weinberger: „Variational properties of steady fall in Stokes flow“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 52 (1972), S. 321–344. DOI: 10.1017/S0022112072001442.
- [20] B. Kaoui u. a.: „Lateral migration of a two-dimensional vesicle in unbounded Poiseuille flow“. In: *Physical Review E* 77 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevE.77.021903.

Erklärung der Selbstständigkeit

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit selbstständig verfasst und dazu keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe. Insbesondere sind die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Stellen als solche kenntlich gemacht.

Die Arbeit wurde bisher in gleicher oder ähnlicher Form keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Ort, Datum

Florian Sammüller