2. ǴÆããǙŰÒ 13 ğŮêŮÏãõǿÒô

2ğ. Ǳǳǹǫǯ Q ǴǶǯǨğǳǫğ

ǦÊÒÏÒÂÊêǽô õÒǽô êǙÊ õÒǽô ÏŮ ŭÊŮφÊűÆÎŮÊŮô

Ǳõ ÒŮŭõŮÛÒÎŰŮô: ğ. ǯǙèÊÒôÏÆêÈô Ï Ǧ. ǯφÒÎŰûâÒÂÏÒô

2-1 Μαλγαρινός Ηλίας, Νικολόπουλος Νικόλαος, Γκαβαϊσες Μανώλης

ǪõÒÛůÈ ůŰǙÂÒÎÊŭǿÒô φÆÎŘ ůǙ ůűǙÊõÊèû ůŘÏǙŰǿŭÊÒ ŘõÈůÊÏÒφÒÊûÎŰǙô ŰÈ ÏŮèÒŭÒÏÒÂǿǙ VOF

2-2 Σ. Τσούκα, Γ. Δημακόπουλος, Ι. Τσαμόπουλος

ûǙÊÎûÏŮÎǙ ÏŮŰǙÎÆůŰŮôůÈô φÒÏôÏŮõÒÛô ÏûÂŘ ãǙèÏǿŭǙô ŰÆůŮŘÎ êǙŰÆ ŰÈ õÒØô ŮÎûô ÏŮφŰÒǙ ôÏŮÎǿÒô êǙŰÆ ÏØèÒô ÏÊǙô ÈÏÊŰÒÎÒŮÊŭÒÛô ŰÒφÒÂõǙűǿǙô

2-3 N.K. Lampropoulos, E.G. Karvelas, I.E. Sarris, and T.E. Karakasidis

Computational modeling of an mri guided drug delivery system based on magnetic nanoparticle aggregations for the navigation of paramagnetic nanocapsules

2-4 Δ. Φραγγεδάκης , Γ. Δημακόπουλος και Γ. Τσαμόπουλος

ǯŮŰÆãǙůÈ Ǚφû ŭÊűǙůÊêØ õÒØ ŰÛφÒô φôõØÎǙ-ŭǙêŰôÏǿÒô ůŮ õÒØ ůŰǙÂÒÎÊŭǿŘÎ, φǙÏÏûÏŮÎÈ õÒØ Ø õÒØ ŭÊǙèõÊŰûÎ űÆůŮŘÎ.

2-5 Μουσμούλης Γ., Πεϊτζίκας Ν., Βαφειάδης Κ., Τουρλιδάκης Α.

ǴŘŮŭÊǙůÏûô, ôφÒÏÒÂÊůŰÊèØ ǙÎÆÏôůÈ êǙÊ ŭÒêÊÏǙůŰÊêûô æÏŮÂŘÒÒ ůôůêŮôØô êÒÊÏÊǙêØô ôφÒãÒØèÈůÈÒ

2-6 Δημήτριος Γ. Μπαϊρακτάρης, Ιωάννης Β. Σούλης, Γεώργιος Δ. Γιαννόγλου

ğÎÆÏôůÈ õÒØô ůŮ ǙõŰÈõÊǙêû ŰÒǿŘŘÏǙ ÏŮ êǙŰÎÒÏØ ǙèÈõÒůêÏÈõŘŰÊêÒÛ ôÏÊêÒÛ

2-7 Anastasios Kopanidis, Ioannis Pantos, Nikolaos Alexopoulos, Andreas Theodorakakos, Efstathios Efstathopoulos, Demosthenes Katritsis

Blood streamlines comparison at patient-specific aorta, with the use of 2 different simulated TAVI valves

2-8 Γ. Πάσχος, Γ. Κόκκορης, Α.Γ. Μπουντουβής

ğǙŘŮǿô ôφÒÏÒÂÊůÏÒǿ ŭÊǙãõÒŘØô ůŮ ôφŮõôŭõûűÒãŮô ŮφÊűÆÎŮÊŮô ÏŮ ůŘŮŭÊǙůÏæÎÈ ÏÒõûÒÏÒÂǿǙ

2-9 Γιώργος Καραπέτσας και Βασίλης Μποντόζογλου

ǯȨ-ÂǒǓǐ ǐÊêǾ ǕîæȊÊîȨ ǗȨô ȨȊǕêǗǒǑ-ôǔǒǑǔôÎǓǐÊêǾô ǓůǗÆèǕÊǓô ÎǕôǗȒÎÊêǑǕ Ǿ ÊîȒǔǑǕȊǓůǗÊêǑǕ ôǐæÎǓ ôɸǜ ɸǕǒÊǑǔÊêǜ ȨȊǕêǗǒÊêǜ ɸǕǔǿǑ

2-10 Demetriou J. And Retsinis E.

Flowing waterȋs velocity structure within partly filled circular channels

2Ǧ. ǄǆǄǴǬǨǬǭ Ǭ ǯ Ǩ ǯ Ǆǫ ǄǮ ǯ ǫǭ Ǭ ǵǨǴ

Dr. Robin Elder (PCA Engineers)

Compressor Developments - Reflections and Challenges

Dr. George Aggidis (Lancaster University)

ǵidal Energy & Technology Current Trends

2ǜ. ǨǬǧ Ǭ ǭ ǹǴǬ

ǄǒǑÔ ǗÊǐǾ ǗǑô ǬǓèȨÂȨǗǾ ǥɸǜůǗǑȊǑô ǜǑǕȊǓ, ǥǒÊůǗǑǗæȊǕÊǑ ǄǓÎǕɸÊůǗǾǐÊǑ ǓǕůůǓȊǑÎǿèȨô, ɸǒǑô ǓÎǓÂÎǜǒÊůȨ ǗȒÎ ôɸȨǒǕůÊǜÎ ǗǑô ůǗȨ ǯȨȒǓÎÊêǾ ǗȒÎ ǆǕôůǗǜÎ êǓÊ ǗȨÎ ǨȊȊȨÎÊêǾ ǥêǓǔȨǐǓǑêǾ ǬǑÊÎǜǗȨǗǓ

2ǧ. Ǭ ǭ ǨǫǴǫ ǯ Ǆ Ǭ ǯ Ǩǆ ǥ Ǵ

ǴôâǾǗȨůȨ

FLOWING WATER'S VELOCITY STRUCTURE WITHIN PARTLY FILLED CIRCULAR CHANNELS

J. Demetriou[(1)] and E. Retsinis[(2)]
[(1), (2)]Civil Engineers, National Technical University of Athens (Greece)
Address: JD Research Hydrolab, 12 St. Polykarpou St., Athens, 17123, Greece
e-mail: idimit@central.ntua.gr, www.drjd-demetriou.eu/

ABSTRACT
In this experimental research study the local (point) mean-time velocities, in water flows within mainly rough-and secondly almost smooth-circular open channels, are presented, analyzed and discussed. The channel diameter (d) is large enough to allow such measurements, which have been electronically performed. The flows have almost constant depth (in each Run), they are subcritical and turbulent, the artificial laboratory roughness consists of hard rubber strips (of 3x3 mm cross sections) at various distances λ among them (constant at each experimental Series), λ/κ=12.5-25-50-100-200 (and ∞, for relatively smooth channel). A large number of local mean time velocities are measured, a number of vertical velocity distributions and isovelocity curves are presented, while some interesting hydraulic characteristics are also investigated.

Keywords: Circular Open Channel. Artificial Roughness.

1. INTRODUCTION

Circular channels partially filled with flowing water, i.e. with a free water surface, are extensively used in water waste or sanitary sewerage systems, in storm conduits, in agricultural hydraulic establishments, in drainage and irrigation systems or even in culverts under roads.

In general, when max discharge Q is the objective, smooth channels are used, but there are also several cases where the channel's boundary material is rough enough.

Fig. 1 shows the general case of rough (or smooth) circular channel's semi-cross section as it may be realized in the hydraulics laboratory. On the inner surface of the circular boundary (d diameter) some rubber strips of an effective height are glued on this surface at normal distances, λ. The cross section of each strip is square (κxκ), and thus the roughness of the channel may be considered as a function of the λ/κ ratio. When λ are small (λ/κ are also small) the entire roughness is strong, while, at the opposite case, when λ/κ are large the roughness is weak, with the limiting case where λ→∞ and λ/κ→∞, or smooth channel.

In the present investigation κ was fixed, κ=3 mm, while λ=37.5-75-150-300-600 mm, or λ/κ=12.5-25-50-100-200-∞. The rough case is primarily examined here, while the smooth channel is rather marginally presented in this investigation.

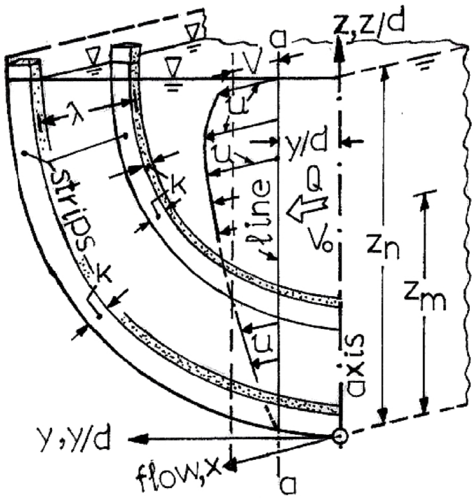


Figure 1. Flow and boundary roughness in the hydraulics laboratory.

In any case the centerline (on the axis) water normal depth is z_n, the entire discharge is Q, the water cross-section is E, V_o=Q/E is the cross-sectional velocity, the flow direction is x, while y is the transverse direction (starting from the centerline bottom point and perpendicular to x). In some cases the ratios z_n/d (flow's aspect ratio) and y/d are of importance. In the present study the water flow is turbulent, quasi uniform and of constant depth in each Run, while the local (mean time)-point-velocities, u, are measured, in order to understand the velocity field structure. All u are measured along vertical traverses (lines, in Fig. 1) and mainly the u velocity diagrams along them (at various constant distances, y/d) are constructed, giving (on any traverse) the mean-depth velocity, V, and corresponding u/V ratios. In all cases, beyond the u distribution along the respective traverses, the isovelocity curves u/V=const. are studied, which can better give the centerline vertical place z_m (or z_m/z_n) where the max(u/V) on the axis is appearing. This place is well known as the "hydraulic centre" of the flow and actually it corresponds to the local boundary layer width on the axis.

In all open channel flows the most important dimensionless general parameter is the Froude number,

$$Fr=V_o\cdot(g\cdot E/B)^{-1/2},$$

where B is the entire length of the free surface in the direction y. In the present study all Froude numbers are less than 1 (subcritical flows). Another considerable dimensionless parameter is the well known Reynolds number,

$$Re=V_o\cdot 4\cdot R/\nu,$$

where R is the hydraulic radius, R=E/P (P = wetted perimeter), and ν is the water's kinematic viscosity. The Re parameter actually shows the turbulence level in any water flow case.

As most interesting pertinent older works, the following are considered: by Cristensen, (1984), Chow, (1959), Camp, (1946), Yarnell et al, (1920), Schmidt, (1953), Bloodgood et al, (1961), and Morris, (1963). The last author has considerably worked on strip's roughness cases in various flow geometries. Also, perhaps of some interest are the books, by the first author, (2005), and by Demetriou et al, (1998), or the paper by Demetriou et al, (2000).

It is to be noted that the concept of "smooth or rough boundaries" are greatly different from the concept of "hydraulically smooth or rough channel".

2. EXPERIMENTS

All present measurements, in 6 Series and 31 Runs are presented in Table 1. All measurements were performed in the hydraulics laboratory of the Nat. Technical Univ. of Athens, School of Civil Engineering, under the inspection of the first author.

The entire experimental establishment had a length of about 12 m, the circular (PVC) channel had an initial diameter d=47.5 cm, and a slope J_o=0.001. Actual discharges, Q, were measured through a Venturi tube on the central water recirculating pipe of the laboratory, via a very reliable carbon tetrachloride differential manometer.

The strips were made from relatively hard (and not distortive) rubber, while the water was entering in the channel through an upstream gravel filter (minimizing all large vortices) and a specially made transitional plactic structure, while the water was leaving the channel after a regulating tail gate. The uniform flow along the channel was checked through a number of upstream-depth measuring-gauges, when these depths had differences less than 1%. The measuring cross section was at a distance around 1.6 m upstream the tail gate, where all depths z_n, y distances and local velocities were measured.

As some first observations it could be mentioned: (i). The continuous increase of Re and Fr is not followed by a continuous increase of the Manning roughness coefficient, n. (ii). The channel was quite rectilinear and the water was quite clear, and (iii). All velocity measurements were made twice.

All Q discharges and cross-sectional velocities V_o were considered as fully accurate, and any local-experimentally measured-velocity, u_e, was corrected after a comparison to $Q=Q'=(\int_E u_e dE)/(V_e \cdot E)$, where dE is an elementary water area around u_e ($\int_E dE=E$). In this way, all final local velocities, u, were received-after the above smoothing out of u_e, although u are still mentioned here as "experimental" local velocities.

Table 1. Basic Measurements.

Series	Run	z_n/d	Q (l/s)	V (cm/s)	Re (min-max)	Fr (min-max)	λ (mm)	λ/κ	Notes
I	1	0.163	5.9 to 73.7	31.0 to 64.5	49,760 to 493,930	0.37 to 0.43	37.5	12.5	Rough Boundaries (Strips)
	2	0.311							
	3	0.495							
	4	0.615							
II	5	0.168	6.1 to 61.6	31.2 to 62.0	66,000 to 373,000	0.36 to 0.43	75	25	
	6	0.330							
	7	0.455							
	8	0.547							
III	9	0.130	6.0 to 69.4	44.4 to 68.4	74,140 to 438,980	0.42 to 0.69	150	50	
	10	0.262							
	11	0.406							
	12	0.558							
IV	13	0.135	6.4 to 69.5	45.5 to 71.5	78,820 to 431,870	0.48 to 0.69	300	100	Rough Boundaries (Strips)
	14	0.244							
	15	0.404							
	16	0.539							
V	17	0.139	7.2 to 70.7	48.5 to 70.2	87,840 to 448,280	0.48 to 0.72	600	200	
	18	0.276							
	19	0.417							
	20	0.553							

VI	21	0.128	6.4 to 85.6	50.0 to 72.0	80,000 to 398,963	0.51 to 0.80	∞	∞	Smooth Boundaries (No Strips)
	22	0.157							
	23	0.237							
	24	0.540							
	25	0.560							
	26	0.602							
	27	0.376							
	28	0.415							
	29	0.480							
	30	0.501							
	31	0.574							

All u experimental velocities were measured through an industrial miniature electronic propeller, with 5 PVC blades-each having a 4 mm radius. The rotor was fitted on a horizontal spindle, which could rotate within a protecting circular frame having a mean radius of 6.5 mm. The entire probe was fixed on a stem, and it could measure velocities at a minimum distance of 7.5 mm from any solid boundary or under any water free surface. The entire arrangement was giving the blades' turns per unit time (Hz), which were transformed to actual local velocities through a special linear chart of Hz-velocity. A proper mechanism was also constructed to move the propeller from point to point into the cross-sections of all measurements.

In this way a large number of final local velocities (out from flow recirculating areas actually over the strips) were measured part of which are presented in this study. It should be mentioned that the u velocities were measured with an error of only ±1% and because of the circular boundary and probe stem, it was not possible to cover a considerable water area-especially with small z_n depths-although the large circular channel diameter. The measured velocities were more accurate for $\lambda \geq 75$ mm than for $\lambda = 37.5$ mm.

3. RESULTS AND DISCUSSION

Figs. 2 to 5 show the corresponding u distributions (and V-dashed vertical lines) for Runs 1 to 4.

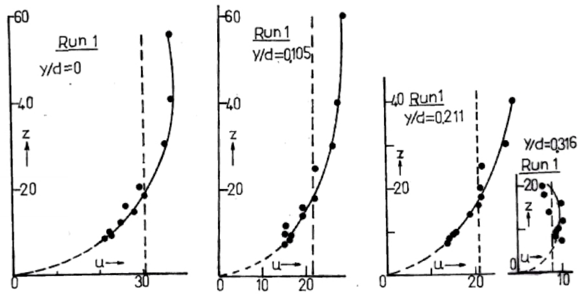


Figure 2. u and V velocities for Run 1.

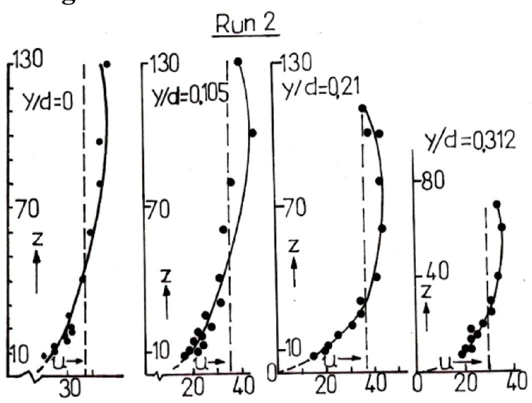


Figure 3. u and V velocities for Run 2.

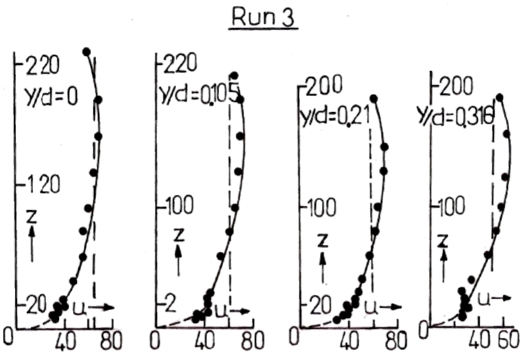


Figure 4. u and V velocities for Run 3.

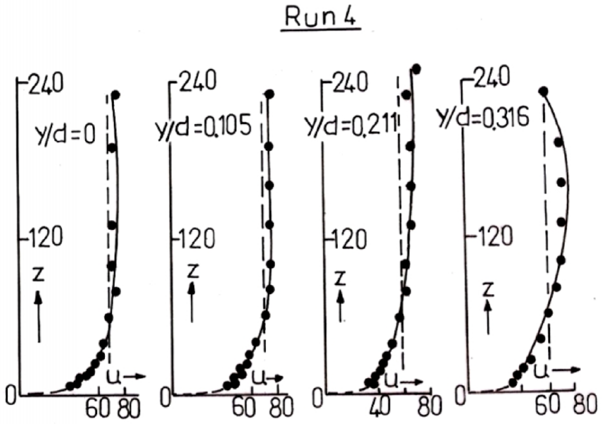


Figure 5. u and V velocities for Run 4.

As it may be seen all results are systematic, they present u=0 on the inner surface of the circular open channel, while almost all u-z velocity distributions near the water free surface give less velocities-than corrsponding velocities deeper in the flowing water mass. This is a fact for all open channel flows and is due to secondary-transverse flows on the cross sections, which are also bending the longitudinal (x) stream lines: Near the free surface these secondary flows are directed from the solid boundary to the lower interior of the flow, while around the flow axis these secondary flows are directed downwards, i.e. $u_m(=u_{max})$ is found not inside the water mass and not on the free surface-but deeper in the cross section.

Fig. 6 is showing a number of isovelocities' lines, u/V=const.(=function of y, z) or u=const., for Runs 9 to 12, i.e. for λ/κ=50-on the one half of the water cross section. Along these lines the shear stresses, τ=0, on the free water surfaces u≠0 but τ=0, on the solid boundaries u=0 and τ≠0 (maxima of all shear stresses), while on the vertical flow axes of symmetry u≠0 and τ=0. On any other line within the flow cross sections, u≠0 and τ≠0.

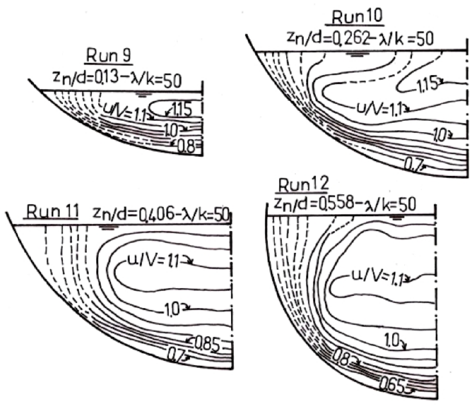


Figure 6. Isovelocities' fields for Runs 9 to 12 (λ/κ=50).

As it may be seen from these Figs. all isovelocity curves, which are ending on the flow axes, are terminating perpendicularly on these axes (symmetry to the other halves of the flows), they present theirs hydraulic centre, z_m, where the velocity u is max, $u=u_m$, under the free surface, while apart from these curves, all the rest of isovels near the circular inner boundary are showing the corresponding boundary layers of the flows. The solid parts of the isovelocity curves are produced from direct measured u/V values, the dashed lines are interpolations or extrapolations, while near the water free surfaces all curves (shorter dashed lines) are taken as perpendicular to these surfaces.

Fig. 7 indicatively shows a similar isovelocities' field for a semi-cross section within a smooth circular open channel-measured in this investigation, which has the same typical characteristics as in Fig. 6-for rough channels.

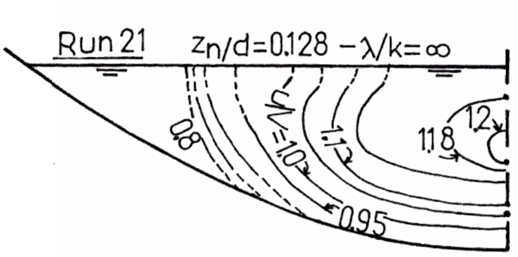


Figure 7. Isovelocities for smooth channel (Run 21) $\lambda/\kappa=\infty$.

Finally Fig. 8 shows, in double logarithmic paper, all z_n/d ratios vs dimensionless discharge $Q\cdot(z_n/d^{-2.5})\cdot(g^{-0.5})$, as all quantities were measured in this study.

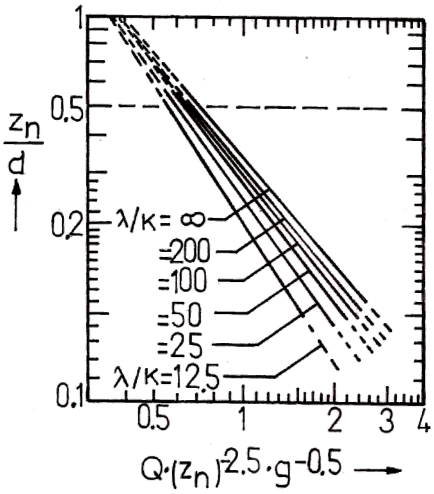


Figure 8. z_n/d vs $Q\cdot(z_n/d^{-2.5})\cdot(g^{-0.5})$.

As it may be seen from Fig. 8 all lines are very systematic in this Figure and show that when z_n/d=const. then $Q\cdot(z_n/d^{-2.5})\cdot(g^{-0.5})$ is increasing with increasing λ/κ ratios, i.e. (since also d=const. in this study) for smoother channels Q are increasing. This is natural since in general smooth channels allow, under same circumstances, larger discharges to flow. On the other hand for $Q\cdot(z_n/d^{-2.5})\cdot(g^{-0.5})$=const. the ratios z_n/d are increasing when the open circular channel becomes more and more smooth. The max Q corresponds to $\lambda/\kappa=\infty$ (smooth circular channels), i.e. no more discharge can be in the channel for corresponding z_n/d. Finally, for $z_n/d=1$, all the straight lines of this figure are intersecting with this particular z_n/d horizontal line. $z_n/d=1$ at some λ/κ ratios roughly correspond to the limiting conditions of the channel before becoming a pipe under pressure. Although, it is should be remembered a anomaly on the maxQ through a smooth circular channel, Demetriou, (2005). Finally for $z_n/d\rightarrow 0$ all discharges should become zero, a fact that cannot be deduced from Fig. 8.

4. CONCLUSIONS

In this experimental study the local (point) mean-time u velocities within a circular open channel (d diameter) are measured, analyzed and discussed. u are electronically measured with a miniature rotating electronic propeller along vertical traverses within the water cross sections at horizontal distances y/d=0-0.105-0.211-0.316. These local velocities appear to be systematic and this is why they can also give a number of normal isovelocity curves on any water cross section, where all flows are of constant depth in each Run,-subcritical-turbulent and quasi uniform along x axis. The main research concerns the flows within rough boundaries' circular open channels, where the artificial roughness is succeeded through transverse rubber strips of square cross sections κxκ (κ=3 mm) and along systematically changing longitudinal distances (λ) among them. The main conclusions are: (i). The u distributions along the vertical traverses appear to be systematic and consistent to boundary and free water surface conditions. (ii). In any such u distribution the depth average velocity V is systematically determined, and further the u/V ratios may be used. (iii). The isovelocities' chart for four water cross sections are presented, with u/V=const. at various y, z, distances. (iv). The isovelocities are systematic and give the maxu on any flow axis. (v). Based on the present measurements a discharge dimensionless quantity is related to relative water depth, and gives the conclusion that for rougher circular open channels, the discharge is less than in corresponding smooth channels. The entire research is aiming at a further understanding of such flows within rough circular open channels.

REFERENCES

Bloodgood D. E. and Bell, J. M., (1961). Manning's Coefficient Calculated From Test Data, Journal of Water Pollution, Vol. 33, p. 176.

Camp T.R., (1946). Design of Sewers to Facilitate Flow Sewage Work, Journal of , N^{o} 18, pp. 1-16.

Chow V. T., (1959). Open Channel Hydraulics, Mc Graw-Hill, N. York.

Christensen B.A., (1984). Analysis of Partially Filled Circular Storm Sewers, Proc. Hydraulics Dir. Conf., ASCE, Aug., pp. 163-167.

Demetriou J. and Dimitriou D., (1998). Elements of Hydraulics for Practical Applications, Vol. 2, Chapter 13 (Elements of Urban Hydraulics), 1998, Book Published by JD Research Hydrolab, Athens, Greece, pp. 507-537.

Demetriou J., Antonopoulou A. and Dimitriou D., (2000). Roughness Coefficient of the Circular Sewer Conduits, Journal of the Technical Chamber of Greece, No 3, pp. 31-45.

Demetriou J., (2005). Applied Hydraulics, Athens, pp. 64 and 219 (an Edition by NTUA).

Morris, M., (1963). Applied Hydraulics in Engineering, Ronowd, p. 47.

Schmidt O. J., (1953). Measurement on Manning's Coefficient, Sewage and Industrial Wastes, Vol. 31, p. 995.

Yarnell D.L. and Woodward, S. M., (1920). The Flow of Water in Drain File, USDA, Bulletin. 854.

ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΝΑΣΤΕΥΣΗΣ ΠΟΛΥΜΕΡΟΥΣ ΛΟΓΩ ΒΑΘΜΙΔΑΣ ΤΑΣΕΩΝ ΚΑΤΑ ΤΗΝ ΡΟΗ ΕΝΟΣ ΛΕΠΤΟΥ ΥΜΕΝΙΟΥ ΚΑΤΑ ΜΗΚΟΣ ΜΙΑΣ ΗΜΙΤΟΝΟΕΙΔΩΣ ΜΕΤΑΒΑΛΛΟΜΕΝΗΣ ΤΟΠΟΓΡΑΦΙΑΣ

Σ. Τσούκα[1], Γ. Δημακόπουλος[1], Ι. Τσαμόπουλος[1]

[1]Εργαστήριο Μηχανικής των Ρευστών και Ρεολογίας, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών 26054 Πάτρα

e-mail: sophia.a.tsouka@gmail.com , dimako@chemeng.upatras.gr, tsamo@chemeng.upatras.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Θεωρούμε τη δισδιάστατη, μόνιμη ροή ενός αραιού πολυμερικού διαλύματος κατά μήκος μιας περιοδικής τοπογραφίας υπό την επίδραση της βαρύτητας. Μας ενδιαφέρει να εξετάσουμε πώς επηρεάζεται η κατανομή του πολυμερούς κατά την εξομάλυνση των διαφόρων τοπογραφικών χαρακτηριστικών από τη ροή και τις φυσικές ιδιότητες μέσα από μια παραμετρική ανάλυση που βασίζεται σε ακριβείς αριθμητικές προσομοιώσεις. Χρησιμοποιούμε το Χαμιλτονιανό μοντέλο των Mavrantzas-Beris (V.G. Mavrantzas and A.N. Beris, 1992) το οποίο μπορεί να προβλέψει τη μετανάστευση των μακρομοριακών αλυσίδων μέσα στο διάλυμα. Το μοντέλο αυτό δεν είναι φαινομενολογικό αλλά βασίζεται σε αρχές θερμοδυναμικής για συστήματα ευρισκόμενα εκτός ισορροπίας. Το σύστημα των διαφορικών εξισώσεων που διέπει το πρόβλημα αποτελείται από την εξίσωση της συνέχειας, το ισοζύγιο της ορμής, την καταστατική εξίσωση και το ισοζύγιο μάζας του πολυμερούς. Η λύση του προκύπτει με χρήση της μεθόδου των μικτών πεπερασμένων στοιχείων σε συνδυασμό με ένα συνοροπροσαρμοζόμενο σύστημα δημιουργίας πλέγματος του φυσικού χώρου. Το τελευταίο είναι αναγκαίο λόγω της παραμόρφωσης της ελεύθερης επιφάνειας του πολυμερικού υμενίου και κατά συνέπεια όλου του φυσικού πεδίου. Για τη στάθμιση της καταστατικής εξίσωσης των τάσεων χρησιμοποιούμε τη μέθοδο SUPG, μαζί με την μέθοδο EVSS-G για την ενίσχυση της ευστάθειας του αριθμητικού σχήματος. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να προβλέψουμε την κατανομή της συγκέντρωσης του πολυμερούς, τις τάσεις, και την ταχύτητα ως συνάρτηση των αδιάστατων παραμέτρων του προβλήματος που είναι οι αριθμοί Deborah, Peclet, Reynolds, ο Τριχοειδής αριθμός, ο λόγος του ιξώδους του διαλύτη προς το συνολικό ιξώδες του ρευστού καθώς και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της τοπογραφίας. Η μετανάστευση του πολυμερούς ενισχύεται με τη γεωμετρική μεταβλητότητα του καναλιού: όσο πιο απότομη και βαθύτερη είναι η κοιλότητα, τόσο ισχυρότερη είναι η μεταφορά του πολυμερούς προς την ελεύθερη επιφάνεια του υμένα. Η μετακίνηση αυτή προκαλεί τη δημιουργία μιας εσωτερικής περιοχής όπου αναπτύσσονται υψηλές ιξωδοελαστικές τάσεις, ενώ οι περιοχές κοντά στην ελεύθερη επιφάνεια καθώς και κοντά στο τοίχωμα παρουσιάζουν μικρές ιξωδοελαστικές τάσεις. Επίσης συμπεραίνουμε πως οι μακρομοριακές αλυσίδες που χαρακτηρίζονται από μεγαλύτερους χρόνους χαλάρωσης μεταναστεύουν προς την ελεύθερη επιφάνεια πιο εύκολα, ενώ η υψηλή επιφανειακή τάση σε συνδυασμό με ένα συγκεκριμένο εύρος τιμών του αριθμού Reynolds μπορεί να προκαλέσει μεγάλες παραμορφώσεις της ελεύθερης επιφάνειας.

Λέξεις Κλειδιά: φαινόμενα μετανάστευσης, ιξωδοελαστική ροή, ροή λεπτού υμενίου, πεπερασμένα στοιχεία

1.ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η μετανάστευση πολυμερών λόγω βαθμίδας τάσεων είναι το φαινόμενο κατά το οποίο οι πολυμερικές αλυσίδες μέσα σε ένα διάλυμα μετακινούνται μακριά από τις περιοχές υψηλής τάσεως σε περιοχές χαμηλής τάσεως στο πεδίο της ροής, ώστε να αποφευχθεί η παραμόρφωσή τους. Το φαινόμενο αυτό, εκτός από το επιστημονικό του ενδιαφέρον, έχει επιπτώσεις σε διάφορες τεχνολογικές εφαρμογές, όπως η επεξεργασία και παραγωγή μικροηλεκτρονικών αντικειμένων. Συχνά, κατά τη διάρκεια της παραγωγής τους, χρησιμοποιούνται διαλύματα πολυμερούς για την επίστρωση λεπτών υμενίων επάνω στις επιφάνειές τους με μεταβαλλόμενη τοπογραφία. Τέτοιες μέθοδοι χρησιμοποιούνται στην κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, αποθηκευτικών συσκευών (όπως μαγνητικοί δίσκοι και ταινίες), συσκευών μνήμης και οπτικών δίσκων. Το πάχος αυτών των υμενίων είναι της τάξεως των 10-500 μικρομέτρων και είναι συγκρίσιμο με το βάθος των τοπογραφικών χαρακτηριστικών του υποστρώματος. Η ποιότητα του προϊόντος και η μορφοποίηση του υποστρώματος μπορεί να απαιτήσει τη χρήση πολυστρωματικών επικαλύψεων, και ένας από τους σκοπούς του κατώτερου στρώματος είναι να εξομαλύνει την άνιση τοπογραφία. Η ανομοιόμορφη επίστρωση οδηγεί σε προϊόντα χαμηλής ποιότητας ή στην αστοχία κατασκευής.
Μας ενδιαφέρει να εξετάσουμε το πώς η κατανομή του πολυμερούς μέσα στο υμένιο κατά την εξομάλυνση των τοπογραφικών χαρακτηριστικών του υποστρώματος επηρεάζεται από τη ροή και τις φυσικές ιδιότητες του ρευστού μέσω μίας παραμετρικής ανάλυσης καθώς και πως αυτή με τη σειρά της επηρεάζει την επίστρωση. Χρησιμοποιούμε το Χαμιλτονιανό μοντέλο δύο ρευστών των Mavrantzas-Beris (V.G. Mavrantzas and A.N. Beris, 1992) το οποίο περιλαμβάνει όρους που καθιστούν δυνατή την πρόβλεψη της πολυμερικής μετανάστευσης. Το πολύπλοκο σύστημα των διαφορικών εξισώσεων που προκύπτει λύνεται μέσω της μεθόδου των μικτών πεπερασμένων στοιχείων σε συνδυασμό με ένα αριθμητικό σχήμα για τη δημιουργία ελλειπτικού πλέγματος για την διακριτοποίηση του φυσικού πεδίου που προκύπτει από την ιδιαίτερα παραμορφωμένη ελεύθερη επιφάνεια.

2.ΚΑΤΑΣΤΡΩΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

2.1 Αδιαστατοποίηση εξισώσεων

Θεωρούμε τη δισδιάστατη, σταθερή ροή ενός ιξωδοελαστικού διαλύματος πολυμερούς, το οποίο ρέει πάνω από μια περιοδική τοπογραφία. Η ροή προκαλείται από τη βαρύτητα, αλλά οι μικρές κλίμακες της γεωμετρίας του υποστρώματος επιτρέπουν ακριβώς την ίδια μεταχείριση και όταν προκαλείται από μία φυγόκεντρο δύναμη, όπως στην περιστροφική επίστρωση (spin coating).

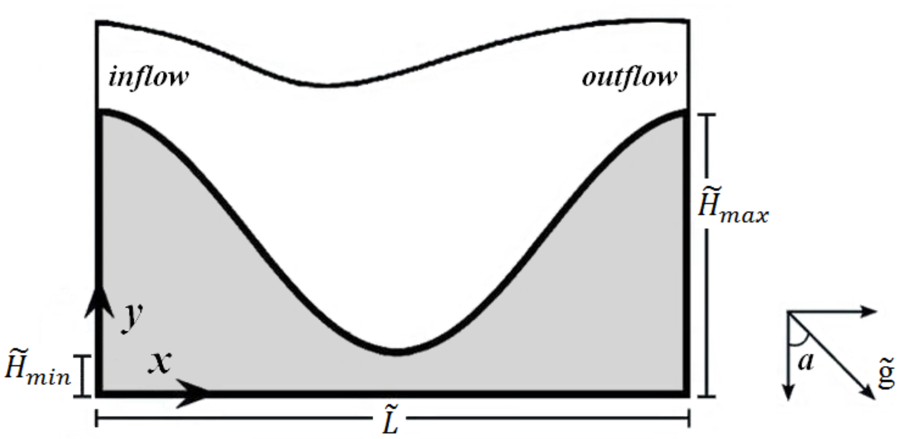
Στο Σχήμα 1 φαίνεται μια σχηματική αναπαράσταση της φυσικής γεωμετρίας του πεδίου. Το $\widetilde{H}_{min}$ και το $\widetilde{H}_{max}$ είναι το μέγιστο και και το ελάχιστο ύψος της περιοδικής διαμόρφωσης του υποστρώματος, αντίστοιχα, ενώ το μήκος της συμβολίζεται με $\tilde{L}_{cell} = \tilde{L}_t/N_{cell}$, όπου $\tilde{L}_t$ είναι το συνολικό μήκος της τοπογραφίας και N_{cell} είναι ο αριθμός των υπολογιστικών κελιών (μεμονωμένα τοπογραφικά χαρακτηριστικά).
Η αδιάστατη μορφή της εξίσωσης του τοιχώματος είναι:

$$H(x) = \frac{1}{2}(1 + c_r) - \frac{1}{2}(1 - c_r)\cos(2\pi x/L_{cell}) - 1 \qquad (1)$$

όπου ο λόγος $c_r = \widetilde{H}_{min}/\widetilde{H}_{max}$ είναι η γεωμετρική μεταβλητότητα της τοπογραφίας.

Το ρευστό θεωρείται ασυμπίεστο με σταθερή πυκνότητα ρ, επιφανειακή τάση σ, πολυμερικό χρόνο χαλάρωσης $\tilde{\lambda}$ (σε μια δεδομένη θερμοκρασία $\tilde{T}$) και ένα συνολικό ιξώδες $\tilde{\eta}_t = \tilde{\eta}_s + \tilde{\eta}_p$, όπου $\tilde{\eta}_s$ και $\tilde{\eta}_p$ είναι οι συνεισφορές του διαλύτη και του πολυμερούς στο ιξώδες του διαλύματος, αντίστοιχα. Το τελευταίο, σύμφωνα με τη θεωρία της γραμμικής ιξωδοελαστικότητας, είναι ανάλογο με την πυκνότητα του πληθυσμού των αλυσίδων $\tilde{n}$: $\tilde{\eta}_p = \tilde{n}k_B\tilde{T}\tilde{\lambda}$, όπου $k_B = 1.3806488x10^{-23}J\,K^{-1}$ είναι η σταθερά Boltzmann, και $\tilde{\lambda}$ είναι ο χρόνος χαλάρωσης του πολυμερούς. Θα πρέπει να επισημανθεί ότι η πυκνότητα του πληθυσμού των αλυσίδων σχετίζεται με την μοριακή συγκέντρωση (σε *mol/m^3*) μέσω της σχέσης $\tilde{C} = \tilde{n}/\tilde{N}_A$, όπου $\tilde{N}_A = 6.022x10^{23}mol^{-1}$ είναι αριθμός του Avogadro.

Για να φέρουμε τις εξισώσεις σε αδιάστατη μορφή, ορίζουμε το ακόλουθο σύνολο των χαρακτηριστικών ποσοτήτων ως εξής: Αδιαστατοποιούμε όλα τα μήκη με το μέγιστο ύψος της διαταραχής ($\tilde{l}^* = \tilde{H}_{max}$). Ως χαρακτηριστική κλίμακα για την ταχύτητα χρησιμοποιούμε τη μέση ταχύτητα του πεδίου, η οποία δίνεται από τη σχέση $\tilde{u}^* =< \underline{\tilde{u}} >= \tilde{u}_m = \frac{\int \tilde{u}_x d\tilde{y}}{\int d\tilde{y}}$, ενώ η πυκνότητα του πληθυσμού των πολυμερικών αλυσίδων αδιαστατοποιείται με τη μέση τιμή της $\tilde{n}^* =< \tilde{n} >= \tilde{n}_m = \frac{\iint \tilde{n} d\tilde{x} d\tilde{y}}{\iint d\tilde{x} d\tilde{y}}$. Κατά συνέπεια, η χαρακτηριστική τιμή για το ιξώδες του πολυμερούς είναι $\tilde{\eta}_p^* =< \tilde{n} > k_B \tilde{T} \tilde{\lambda}$, ενώ η χαρακτηριστική τιμή για το συνολικό ιξώδες είναι $\tilde{\eta}_t^* = \tilde{\eta}_s +< \tilde{n} > k_B \tilde{T} \tilde{\lambda}$. Τέλος, η πίεση και οι τάσεις αδιαστοποιούνται με τον ιξώδη τρόπο, $\tilde{\tau}_p{}^* = \tilde{P}^* = \frac{\tilde{\eta}_t^* \tilde{u}_m}{\tilde{H}_{max}}$.



Σχήμα 1. Σχηματική απεικόνιση της γεωμετρίας του πεδίου ροής.

2.2 Μαθηματική Μοντελοποίηση

Σε αυτή τη δουλειά χρησιμοποιούμε το Χαμιλτονιανό καταστατικό μοντέλο δύο ρευστών των Mavrantzas-Beris (V.G. Mavrantzas and A.N. Beris, 1992) για την περιγραφή των ιξωδοελαστικών τάσεων. Το μοντέλο αυτό εισάγει μια σύζευξη των εξισώσεων διάχυσης και ορμής μέσω της κινητικής θεωρίας. Αυτή η σύζευξη επιτυγχάνεται με προσαρμογή των παραμέτρων του Χαμιλτονιανού μοντέλου δύο φάσεων με εκείνες που αντιστοιχούν στο μοντέλο των αλυσίδων Rouse σε ένα αραιό διάλυμα και με μοντελοποίηση της διάχυσης μέσω της κινητικής θεωρίας, χωρίς την υπόθεση της χωρικής ομοιογένειας.

Στο πλαίσιο της θερμοδυναμικής μη-ισορροπίας, η ροή του πολυμερούς δίδεται από τη σχέση $\underline{J} = -\frac{1}{Pe}(\underline{\nabla} n - \frac{De}{1-\beta}\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\tau}}_p)$ σε αδιάστατη μορφή, όπου ο πρώτο όρος αντιπροσωπεύει τη διάχυση Fick ($\underline{J}^p = -\frac{1}{Pe}\underline{\nabla} n$), ενώ ο δεύτερος όρος εκφράζει την επίδραση της μετανάστευσης που προκαλείται από τις ελαστικές συνεισφορές στον τανυστή των τάσεων ($\underline{J}^s = \frac{De}{Pe(1-\beta)}\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\tau}}_p$).

Ακολουθώντας το φορμαλισμό των Apostolakis et al. (2002) τα ισοζύγια πολυμερικού πληθυσμού και ορμής γράφονται, αντίστοιχα, σε αδιάστατη μορφή ως:

$$\frac{Dn}{Dt} = \frac{1}{Pe}\underline{\nabla}^2 n - \frac{De}{Pe(1-\beta)}\underline{\nabla}\,\underline{\nabla} : \underline{\underline{\tau}}_p = -\underline{\nabla} \cdot \underline{J} \quad (2)$$

και

$$Re\frac{D\underline{u}}{Dt} = -\underline{\nabla} P_{per} - St\underline{g} + \underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\tau}}_p + \beta \underline{\nabla}^2 \underline{u} \quad (3)$$

όπου η υλική παράγωγος ορίζεται ως:

$$\frac{D\circ}{D\tilde{t}} = \frac{\partial \circ}{\partial t} + \underline{u} \cdot \underline{\nabla} \circ \quad (4)$$

Οι αδιάστατοι χαρακτηριστικοί αριθμοί που προκύπτουν είναι οι ακόλουθοι:

- Ο αριθμός Reynolds, $Re = \frac{\tilde{\rho}\tilde{u}_m\tilde{H}_{max}}{\tilde{\eta}_t}$, ο οποίος είναι ο λόγος των αδρανειακών προς τις ιξώδεις δυνάμεις.
- Ο αριθμός Deborah, $De = \frac{\tilde{\lambda}\tilde{u}_m}{\tilde{H}_{max}}$, ο οποίος είναι ο λόγος του χρόνου χαλάρωσης του ρευστού προς ένα χαρακτηριστικό χρόνο της μακροσκοπικής ροής.
- Ο αριθμός Peclet, $Pe = \frac{\tilde{u}_m\tilde{H}_{max}}{\tilde{D}_{tr}}$, ο οποίος είναι ο λόγος της ροής λόγω συναγωγής προς τη διαχυτική ροή των μακρομορίων.
- Ο λόγος του διαλύτη προς το συνολικό ιξώδες, $\beta = \frac{\tilde{\eta}_s}{\tilde{\eta}_s + <\tilde{n}> k_B\tilde{T}\tilde{\lambda}}$, ο οποίος είναι ένα μέτρο του κορεσμού του διαλύματος σε πολυμερές.
- Ο αριθμός Stokes, $St = \frac{\tilde{\rho}\tilde{G}\tilde{H}_{max}^2}{\tilde{\eta}_t\tilde{u}_m}$, ο οποίος είναι ένα μέτρο της αντίστασης στη ροή, ανάλογο με τη συνολική οπισθέλκουσα δύναμη στον τοίχο.

Για την καταστατική εξίσωση χρησιμοποιούμε το τροποποιημένο μοντέλο Oldroyd-B καθώς και το τροποποιημένο μοντέλο ePTT. Αυτά είναι, αντίστοιχα:

$$\underline{\underline{\tau}}_p + De\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}_p - (1-\beta)\frac{Dn}{Dt}\underline{\underline{I}} - 2n(1-\beta)\dot{\underline{\underline{\gamma}}} = \underline{\underline{0}} \quad (5)$$

$$\underline{\underline{\tau}}_p \exp\left\{\frac{De}{(1-\beta)}\frac{\varepsilon}{n}tr\left(\underline{\underline{\tau}}_p\right)\right\} + De\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}_p - (1-\beta)\frac{Dn}{Dt}\underline{\underline{I}} - 2n(1-\beta)\dot{\underline{\underline{\gamma}}} = \underline{\underline{0}} \quad (6)$$

όπου ε είναι μια παράμετρος η οποία θέτει ένα άνω όριο στο εκτατικό ιξώδες, το οποίο αυξάνεται καθώς η παράμετρος μειώνεται, ενώ επηρεάζει και το διατμητικό ιξώδες και εν τέλει καθορίζει τις ιδιότητες του ιξωδοελαστικού ρευστού.

Ακόμα, $\dot{\underline{\underline{\gamma}}}$ είναι ο τανυστής του ρυθμού παραμορφώσεων ο οποίος ορίζεται ως:

$$\dot{\underline{\underline{\gamma}}} = \frac{1}{2}\left[(\underline{\nabla}\,\underline{u})^T + \underline{\nabla}\,\underline{u}\right] \quad (7)$$

και όπου ο $\underline{\underline{I}}$ είναι ο μοναδιαίος τανυστής και το σύμβολο $\overset{\nabla}{\circ}$ συμβολίζει την άνω συνηγμένη χρονική παράγωγο η οποία ορίζεται ως:

$$\overset{\nabla}{\circ} = \frac{D\circ}{Dt} - (\underline{\nabla}\underline{u})^T \cdot \circ - \circ \cdot (\underline{\nabla}\underline{u}) \quad (8)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις πρέπει να λυθούν μαζί με την εξίσωση διατήρησης της μάζας στο πλαίσιο της υπόθεσης ασυμπίεστου ρευστού, και συγκεκριμένα:

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{u} = 0 \quad (9)$$

2.3 Συνοριακές συνθήκες

Για να ολοκληρωθεί το πρόβλημα, οι εξισώσεις πρέπει να λυθούν μαζί με συνεπείς συνοριακές συνθήκες.
Κατά την διεύθυνση της ροής, υποθέτουμε ότι η ταχύτητα, οι ιξωδοελαστικές τάσεις και η πυκνότητα πληθυσμού του πολυμερούς είναι περιοδικές συναρτήσεις:

$$\underline{u}(x + L_{cell}, y) = \underline{u}(x, y) \quad (10)$$

$$\underline{\tau}_p(x + L_{cell}, y) = \underline{\tau}_p(x, y) \quad (11)$$

$$n(x + L_{cell}, y) = n(x, y) \quad (12)$$

Αντίστοιχα εφαρμόζουμε περιοδική συνοριακή συνθήκη και για την πίεση.
Το τοίχωμα θεωρείται αδιαπέραστο και τα μόρια του διαλύτη δεν μπορεί να γλιστρήσουν κατά μήκος του:

$$\underline{u} = \underline{0} \quad (13)$$

Δεν υπάρχει ροή μάζας του πολυμερούς διαμέσου του τοιχώματος:

$$\underline{n}_w \cdot \underline{J} = 0 \qquad (14)$$

όπου $\underline{n}_w$ είναι το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια του τοιχώματος.

Κατά μήκος της ελεύθερης επιφάνειας του φιλμ, το πεδίο ταχύτητας θα πρέπει να πληροί ένα τοπικό ισοζύγιο δύναμης μεταξύ τριχοειδών δυνάμεων, τάσεων στο υγρό και πίεσης στο περιβάλλον ρευστό. Χωρίς απώλεια της γενικότητας, η πίεση της περιβάλλουσας αέριας φάσης P_g τίθεται ίση με μηδέν.

$$n \cdot \left(-p\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}\right) = -P_g \underline{n} + \frac{2H_c}{Ca}\underline{n} \qquad (15)$$

όπου $\underline{n}$ είναι το προς τα έξω κάθετο διάνυσμα στην ελεύθερη επιφάνεια και $2H_c$ είναι η μέση καμπυλότητα, η οποία ορίζεται ως:

$$2H_c = -\underline{\nabla}_S \cdot \underline{n} \qquad (16)$$

$$\underline{\nabla}_S = \left(\underline{\underline{I}} - \underline{n}\underline{n}\right) \cdot \underline{\nabla} \qquad (17)$$

και $Ca = \frac{\tilde{\eta}_t \tilde{u}_m}{\tilde{\sigma}}$ είναι ο τριχοειδής αριθμός, ο οποίος είναι ο λόγος των ιξωδών δυνάμεων προς την επιφανειακή τάση.

Ακόμα, η κάθετη προς την ελεύθερη επιφάνεια συνιστώσα της ταχύτητας και της συνολικής ροής πολυμερούς είναι μηδέν:

$$\underline{n} \cdot \underline{u} = 0 \qquad (18)$$

$$\underline{n} \cdot \underline{J} = 0 \qquad (19)$$

Τέλος, εφαρμόζουμε περιορισμούς ότι η μέση πυκνότητα πληθυσμού πολυμερούς στο πεδίο ροής και η μέση ταχύτητα κατά μήκος της εισόδου είναι ίσες με τη μονάδα, επειδή έχουν αδιαστατοποιηθεί με τη μέση πυκνότητα πληθυσμού πολυμερούς και τη μέση ταχύτητα, αντίστοιχα:

$$\frac{\iint n dx dy}{\iint dx dy} = 1 \qquad (20)$$

$$\frac{\int u_x dy}{\int dy} = 1 \qquad (21)$$

Για να ενισχύσουμε την αριθμητική ευστάθεια των υπολογισμών μας χρησιμοποιούμε τη μέθοδο χωρισμού ελαστικών-ιξωδών τάσεων EVSS (Elastic-Viscous Split Stress) όπως προτάθηκε από τους Rajagopalan *et al.* (1990), και με την οποία ο επιπλέων τανυστής των τάσεων χωρίζεται σε ένα ιξώδες και ένα αμιγώς ελαστικό κομμάτι:

$$\underline{\underline{\tau}}_p = \underline{\underline{\Sigma}} + 2(1-\beta)\underline{\underline{\dot{\gamma}}} \qquad (22)$$

3.ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ

3.1 Ελλειπτική γεννήτρια πλέγματος

Για την κατασκευή του πλέγματος, η περιοχή που καταλαμβάνει το ρευστό *(x,y)* απεικονίζεται σε ένα υπολογιστικό πεδίο *(η,ζ)*, το οποίο είναι ο χώρος τον οποίο το ρευστό θα καταλάμβανε εάν παρέμενε απαραμόρφωτο υπεράνω επίπεδου υποστρώματος. Σε αυτό το πεδίο δημιουργούμε ένα ομοιόμορφο πλέγμα, ενώ το αντίστοιχο πλέγμα στο φυσικό πεδίο ακολουθεί τις παραμορφώσεις που προκαλεί η μεταβαλλόμενη τοπογραφία και η ροή. Αυτό επιτυγχάνεται με την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων της ελλειπτική γεννήτρια πλέγματος, όπως έχουν αναπτυχθεί από τους Dimakopoulos & Tsamopoulos (2003).

3.2 Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων μεικτού τύπου

Προσεγγίζουμε την πυκνότητα πληθυσμού, την ταχύτητα και το διάνυσμα θέσης με συναρτήσεις βάσης Lagrange 6 κόμβων, φ^i, και την πίεση, τις ελαστικές τάσεις και τις βαθμίδες της ταχύτητας με συναρτήσεις βάσης Lagrange 3 κόμβων, ψ^i. Εφαρμόζουμε τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων/Galerkin και κάνοντας χρήση του θεωρήματος της απόκλισης λαμβάνουμε την ασθενή μορφή της εξίσωσης διάχυσης:

$$\int_{\Omega}\left[-\underline{\hat{J}}\cdot\underline{\nabla}\,\varphi^{i}\right]d\Omega+\int_{S}\left[\underline{\hat{J}}\cdot\underline{n}\right]\varphi^{i}dS=0 \quad (23)$$

όπου $\underline{\hat{J}}=\underline{J}+n\underline{u}$ είναι η συνολική ροή μάζας στην εξίσωση διάχυσης.

Αντίστοιχα, οι ασθενείς μορφές των εξισώσεων διατήρησης ορμής και μάζας γράφονται:

$$\int_{\Omega}\left[Re\,\underline{u}\cdot\underline{\nabla}\,\underline{u}\,\varphi^{i}-P\underline{\nabla}\varphi^{i}-\kappa^{2}\underline{e}_{x}\varphi^{i}+\underline{\nabla}\varphi^{i}\cdot\underline{\underline{\Sigma}}+2\underline{\nabla}\varphi^{i}\cdot\underline{\underline{\dot{\gamma}}}\right]d\Omega-\int_{S}\left[\underline{n}\cdot\underline{\underline{\sigma}}\right]\varphi^{i}dS=0 \quad (24)$$

$$\int_{\Omega}\psi^{i}\nabla\cdot u\,d\Omega=0 \quad (25)$$

Όπου $d\Omega$ και $d\Gamma$ είναι ο διαφορικός όγκος και το διαφορικό εμβαδόν επιφάνειας του πεδίου ροής, και $\underline{\underline{\sigma}}=\underline{\underline{\Sigma}}+2\underline{\underline{\dot{\gamma}}}-P\underline{\underline{I}}$.

Τέλος, λόγω του υπερβολικού χαρακτήρα του μοντέλου των πολυμερικών τάσεων εξ. (5), είναι αναγκαία η χρήση της μεθόδου SUPG (Streamline Upwind Petrov Galerkin) η οποία προτάθηκε από τους Brooks & Hughes(1982):

$$\int_{\Omega}\left[\underline{\underline{\Sigma}}+De\overset{\nabla}{\underline{\underline{\Sigma}}}+2\,De(1-\beta)\overset{\nabla}{\underline{\underline{D}}}-(1-\beta)\frac{Dn}{Dt}\underline{\underline{I}}+2(1-\beta)(1-n)\underline{\underline{D}}\right]\chi^{i}=\underline{\underline{0}} \quad (26)$$

Όπου η συνάρτηση βάρους χ^{i} σχηματίζεται από τον συνδυασμό των συναρτήσεων βάσης των πεπερασμένων στοιχείων σύμφωνα με τη σχέση:

$$\chi^{i}=\psi^{i}+\frac{h_{ch}}{|\underline{u}|}\underline{u}\cdot\underline{\nabla}\psi^{i} \quad (27)$$

όπου $|\underline{u}|$ είναι το μέτρο της μέσης ταχύτητας και h_{ch} το χαρακτηριστικό μήκος σε κάθε στοιχείο. Με παρόμοιο τρόπο μπορούμε να εξάγουμε και την ασθενή μορφή της εξίσωσης των PTT.

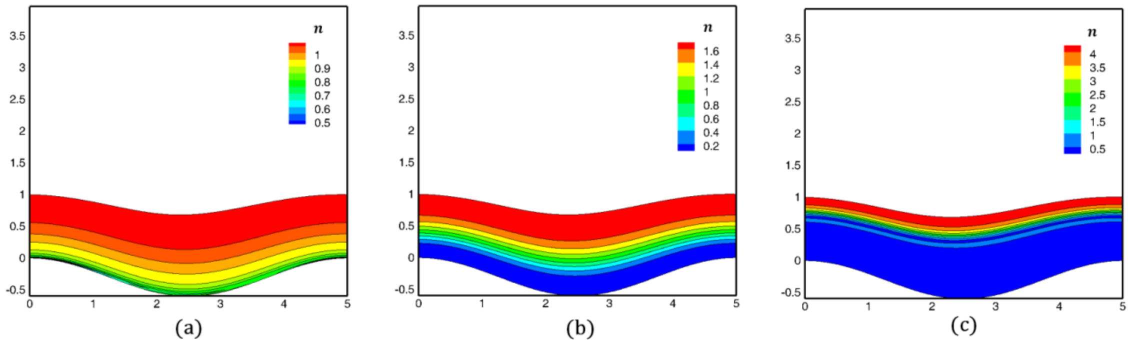
Σύμφωνα με τους Pavlidis et al. (2010) το σύνολο των αλγεβρικών εξισώσεων πρέπει να επιλυθούν ταυτόχρονα για όλες τις μεταβλητές (πυκνότητα πληθυσμού, ταχύτητες, πίεση, τάσεις και τη θέση των κόμβου).

4.ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ/ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

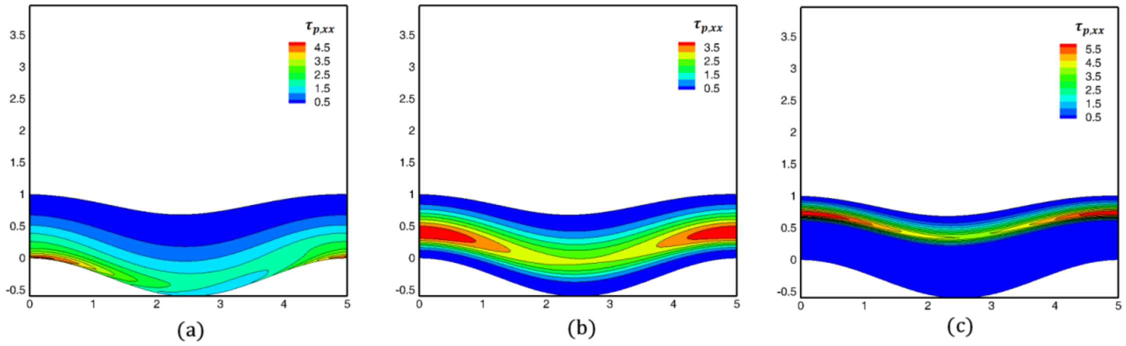
Τα αποτελέσματα που ακολουθούν εξήχθησαν χρησιμοποιώντας το τροποποιημένο μοντέλο Oldroyd-B. Βλέπουμε πως η πολυμερική μετανάστευση συμβαίνει κοντά στην επιφάνεια του τοιχώματος και έχουμε συσσώρευση του πολυμερούς γύρω από την ελεύθερη επιφάνεια. Αυτή ενισχύεται έντονα από την ελαστικότητα του πολυμερούς: όσο μεγαλύτερος ο αριθμός Deborah, τόσο ισχυρότερη η μετανάστευση του πολυμερούς προς την ελεύθερη επιφάνεια του υμενίου (Σχήμα 2).

Έτσι παρατηρούμε τη ταυτόχρονη δημιουργία ενός εξαντλημένου από πολυμερές στρώματος κοντά στο τοίχωμα το οποίο αποτελείται αποκλειστικά από το διαλύτη καθώς οι πολυμερικές αλυσίδες μεταναστεύουν μακριά από αυτό. Σε συνθήκες όπου ευνοείται η μετανάστευση, στην προκειμένη με αύξηση της παραμέτρου ελαστικότητας, το πάχος αυτού του στρώματος αυξάνει αισθητά, και προκαλεί ισχυρή ανάπτυξη των τάσεων μακριά από το τοίχωμα (Σχήμα 3).

Συγκεκριμένα, οι μέγιστες τιμές των τάσεων για μικρούς *De* βρίσκονται πάνω στην επιφάνεια του τοιχώματος και συγκεκριμένα στο υψηλότερο σημείο της τοπογραφίας, ενώ σε μεγαλύτερους *De* αυτά τα μέγιστα μετατοπίζονται προς την ελεύθερη επιφάνεια. Αυτό οδηγεί στη δημιουργία μιας λωρίδας μέσα στην οποία παρατηρούνται απότομες μεταβολές των τάσεων, η οποία μετατοπίζεται μακριά από το τοίχωμα ενώ γίνεται ολοένα πιο στενή.



Σχήμα 2. Ισοϋψείς της πυκνότητας πληθυσμού του πολυμερούς για *De* = 1.5 (a), *De* = 5.5 (b), και *De* = 30.5 (c)

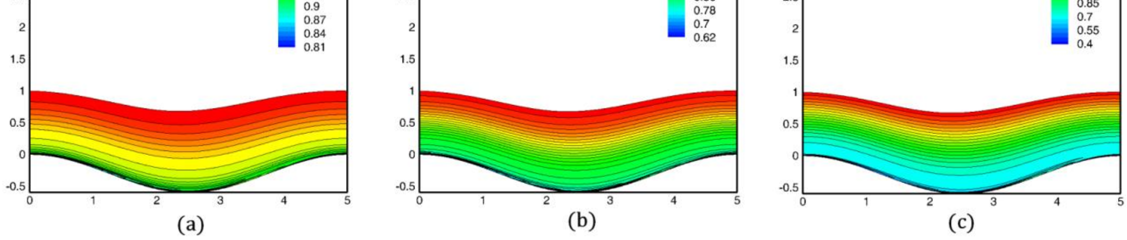


Σχήμα 3. Ισοϋψείς της συνιστώσας $\tau_{p,xx}$ των ιξωδοελαστικών τάσεων για *De* = 1.5 (a), *De* = 5.5 (b), και *De* = 30.5 (c)

Αντίστοιχα, με χρήση του τροποποιημένου καταστατικού μοντέλου ePTT παρατηρούμε την ίδια συμπεριφορά με αυξανόμενο *De*, αλλά μπορούμε να δούμε και την επίδραση της παραμέτρου *ε*, αφού η κατανομή της πυκνότητας πληθυσμού είναι πολύ πιο ομοιόμορφη (Σχήμα 4). Το ίδιο φαινόμενο μπορούμε να παρατηρήσουμε και στην κατανομή των τάσεων: Οι μέγιστες τιμές των τάσεων και πάλι απομακρύνονται από την περιοχή του τοιχώματος αλλά δεν παρατηρείται η δημιουργία της ζώνης έντονων μεταβολών των τάσεων.

Η ενίσχυση του φαινομένου εξαρτάται έντονα και από τη γεωμετρική μεταβλητότητα του τοιχώματος: όσο πιο απότομη και βαθύτερη η κοιλότητα, τόσο πιο έντονο το φαινόμενο της μετανάστευσης και η δημιουργία του χαμηλής συγκέντρωσης στρώματος κοντά στο τοίχωμα και μέσα στην κοιλότητα. Η ανάπτυξη αυτού του στρώματος δημιουργεί μια φαινομενική ολίσθηση στο υψηλότερο τμήμα του τοιχώματος και μια μονότονη ελάττωση του αριθμού Stokes, δηλαδή διευκόλυνση της ροής.

Αυτές οι προβλέψεις συμφωνούν και με τα πρόσφατα αποτελέσματα των Tsouka et al. (2014) για τη ροή μέσα σε κανάλι μεταβαλλόμενης διατομής.



Σχήμα 4. Ισοϋψείς της πυκνότητας πληθυσμού του πολυμερούς με χρήση του τροποποιημένου μοντέλου ePTT για *De* = 1.5 (a), *De* = 5.5 (b), και *De* = 30.5 (c)

Τέλος, παρατηρήσαμε πως η μεγάλη επιφανειακή τάση, σε μια περιοχή αριθμών Reynolds μπορεί να προκαλέσει μεγάλες παραμορφώσεις στην ελεύθερη επιφάνεια. Σε ακόμη υψηλότερες τιμές αριθμού Reynolds, οι αδρανειακές επιδράσεις κυριαρχούν και οδηγούν στο σχηματισμό μιας ζώνης επανακυκλοφορίας κοντά στο τοίχωμα και στο βαθύτερο τμήμα της κοιλότητας, αναγκάζοντας τη ροή στην υπόλοιπη διατομή να γίνεται σχεδόν εμβολική, παρακάμπτοντας τελείως την κοιλότητα.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Το έργο αυτό πραγματοποιήθηκε υπό την υποστήριξη του προγράμματος «Αριστεία Ι» (FilCoMicrA 1918), με την συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής ένωσης.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Apostolakis, M. V., V.G. Mavrantzas, and A.N. Beris, “Stress gradient-induced migration effects in the Taylor-Couette flow of a dilute polymer solution”, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **102,** 409-445 (2002).

Dimakopoulos, Y., and J. Tsamopoulos, “A quasi-elliptic transformation for moving boundary problems with large anisotropic deformations”, J. Computational Phys. **192,** 494-522 (2003).

Mavrantzas, V. G., and A.N. Beris, “Modelling the rheology and the flow-induced concentration changes in polymer solutions,” Phys. Rev. Lett. **69**, 273-276 (1992); Errata70, 2659 (1993).

Pavlidis, M. , Y. Dimakopoulos, and J. Tsamopoulos, “Steady viscoelastic film flow over 2D topography: I. The effect of viscoelastic properties under creeping flow”, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **165**(11-12), 576-591 (2010).

Rajagopalan, D. , R.C. Armstrong, and R.A. Brown, “Finite element methods for calculation of steady, viscoelastic flow using constitutive equations with a Newtonian viscosity”, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **36**, 159-192 (1990).

Tsouka, S. , Y. Dimakopoulos, V.G. Mavrantzas and J. Tsamopoulos, “Stress-gradient induced migration of polymers in corrugated channels”, J. Rheol. **58**(4), 911-947 (2014).

POLYMER STRESS-GRADIENT INDUCED MIGRATION IN THIN FILM FLOW OVER A CORRUGATED TOPOGRAPHY

ABSTRACT

We consider the two dimensional, steady flow of a viscoelastic dilute polymer solution over a periodic topography under the action of a body force. We are interested in examining how the distribution of polymer in the planarization of various topographical features is affected by flow and physical properties through a parametric analysis. The Mavrantzas-Beris, two-fluid Hamiltonian model is used in order to allow for polymer migration; a model which is based on non-equilibrium thermodynamics. The resulting complex system of differential equations is solved via the mixed finite element method combined with a quasi-elliptic grid generation scheme for the tessellation of the physical domain resulting by the highly deformed free surface. We use the SUPG method for the weighting of the constitutive equations along with the EVSS-G splitting method for the computation of the elastic stresses and a local mesh refinement around specific corners of the geometry. We present numerical results for polymer concentration, stress, velocity and flux of components as a function of the non-dimensional parameters of the problem: the Deborah number De, the Peclet number Pe, the Reynolds number Re, the Capillary number Ca, the ratio of the solvent viscosity to the total fluid viscosity, and the dimensionless length variability of the substrate L. The migration phenomenon is enhanced by the variability of the channel: the more steep the cavity, the stronger the transfer of polymer to the free surface. This enhances the spatial extent of polymer depletion and induces strong banding in the stresses away from the substrate wall, especially in low polymer concentration; phenomena that the homogenous Oldroyd-B model cannot capture. Macromolecules with longer relaxation times are predicted to migrate towards the free surface more easily, while high surface tension combined with a certain range of Reynolds numbers can give rise to large deformations of the free surface.

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΕΝΟΣ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΣΤΟΧΕΥΜΕΝΗΣ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΦΑΡΜΑΚΟΥ ΒΑΣΙΣΜΕΝΟ ΣΤΗΝ ΧΡΗΣΗ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΤΟΜΟΓΡΑΦΟΥ ΓΙΑ ΤΗΝ ΟΔΗΓΗΣΗ ΣΦΑΙΡΙΚΩΝ ΜΙΚΡΟΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ

Ν. Κ. Λαμπρόπουλος[1], Ε. Γ. Καρβέλας[2], Ι. Ε. Σαρρής[3], Τ. Ε. Καρακασίδης[4].

[1] Ερευνητής, Τμήμα Ενεργειακής Τεχνολογίας, Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό ίδρυμα Αθηνών, nikolaoslampropoulos@hotmail.com
[2] Υποψήφιος διδάκτωρ, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, karvelas@civ.uth.gr
[3] Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Ενεργειακής Τεχνολογίας, Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό ίδρυμα Αθηνών, sarris@teiath.gr, http://fluids.et.teiath.gr/
[4] Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, thkarak@civ.uth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα ερευνητική εργασία παρουσιάζεται η ανάπτυξη μιας υπολογιστικής μεθόδου και τα συγκριτικά αποτελέσματα με αντίστοιχα πειράματα για τη μαγνητική οδήγηση σωματιδίων μέσα από αρτηρίες που ως σκοπό έχουν τη μεταφορά φαρμάκου κοντά σε καρκινικούς όγκους. Το μοντέλο βασίζεται σε σφαιρικά σωματίδια, τα οποία κάτω από την επίδραση σταθερού μαγνητικού πεδίου δημιουργούν συσσωματώματα και ταυτόχρονα καθοδηγούνται στην επιθυμητή περιοχή με τη βοήθεια μιας βαθμίδας μαγνητικού πεδίου. Τα δύο μαγνητικά πεδία δημιουργούνται εξωτερικά από έναν μαγνητικό τομογράφο (MRI). Όπως φαίνεται από τη συζήτηση, τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων βρίσκονται σε πάρα πολύ καλή ταύτιση με τα αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα σε διαλύματα που συγκρίθηκαν και δείχνουν την επιτυχία της μεθόδου στην πρόβλεψη τόσο του μήκους όσο και της ταχύτητας των συσσωματωμάτων στη ροή.

Λέξεις Κλειδιά:
Συσσωμάτωμα, Μαγνητικά μικροσωματίδια, Στοχευμένη μεταφορά φαρμάκου.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η καταπολέμηση των καρκινικών κυττάρων στη σημερινή εποχή γίνεται με τη χρήση χημειοθεραπείας. Το βασικό μειονέκτημά αυτής της μεθόδου είναι η μη στοχευμένη χρήση της που έχει ως αποτέλεσμα το φάρμακο να διαχέεται σε όλον τον οργανισμό και να επιτίθεται μαζί με τα καρκινικά και στα υγιή κύτταρα. Αποτέλεσμα αυτού είναι η πρόκληση παρενεργειών, όπως πχ. η τοξικότητα στο νεφρό και στο συκώτι. Για τη μείωση των παρενεργειών της χημειοθεραπείας, οι ερευνητές στα τέλη της δεκαετίας του '70 χρησιμοποίησαν μαγνητικά σωματίδια με σκοπό να οδηγήσουν τις ουσίες του φαρμάκου στις επιθυμητές περιοχές [Senyei et al.(1978)]. Αυτό μπορεί να έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση της ποσότητας φαρμάκου που εισέρχεται στον οργανισμό, εξαιτίας του ότι πλέον το φάρμακο δεν διαχέεται σε όλον τον οργανισμό, αλλά οδηγείται σε στοχευμένες περιοχές. Στη μέθοδο μαγνητικής οδήγησης, οι ουσίες των φαρμάκων επικαλύπτουν την επιφάνεια των μαγνητικών σωματιδίων. Στη συνέχεια, τα σωματίδια εισάγονται στον οργανισμό με τη χρήση ενός καθετήρα. Για την οδήγησή τους στην επιθυμητή περιοχή είναι αναγκαία η χρήση μεγάλων βαθμωτών μαγνητικών πεδίων, τα οποία μπορούν να δημιουργηθούν από έναν μαγνητικό τομογράφο (MRI).

Η απόδοση της μεθόδου εξαρτάται από πολλούς φυσικούς παράγοντες: το υλικό από το οποίο είναι κατασκευασμένα τα σωματίδια, καθώς επίσης και τη δύναμη του μαγνητικού πεδίου [Llandro et al(2010), Widder et al(1983)]. Επιπρόσθετα, όσο μικρότερη είναι η ροή αίματος μέσα στις αρτηρίες, τόσο αποδοτικότερη είναι η μέθοδος. Το μέγεθος των σωματιδίων είναι ένας κρίσιμος παράγοντας για την αποτελεσματικότητα της μεθόδου. Όσο μικρότερα είναι τα σωματίδια, τόσο μικρότερη είναι και η απόκρισή τους στο μαγνητικό πεδίο. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την αύξηση της δυσκολίας στην καθοδήγηση των σωματιδίων στις επιθυμητές περιοχές. Για την αντιμετώπιση αυτής της δυσκολίας, γίνεται χρήση μαγνητικών σωματιδίων, τα οποία κάτω από την επίδραση σταθερού μαγνητικού πεδίου έλκουν το ένα το άλλο με αποτέλεσμα την δημιουργία συσσωματωμάτων [Mathieu & Martel (2009)]. Ως αποτέλεσμα, αυξάνεται η μαγνητική απόκριση των σωματιδίων, καθώς η μαγνητική ροπή των συσσωματωμάτων είναι μεγαλύτερη από αυτήν των απομονωμένων σωματιδίων. Όταν τα συσσωματώματα φθάσουν στην επιθυμητή περιοχή, πρέπει να διαχωριστούν σε απομονωμένα σωματίδια για την εναπόθεση του φαρμάκου. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί με τη χρήση παραμαγνητικών σωματιδίων, τα οποία χάνουν τον μαγνητισμό τους, όταν βρεθούν εκτός μαγνητικού πεδίου.

Εξαιτίας του γεγονότος ότι είναι αδύνατο να αναπτυχθεί μια αναλυτική μελέτη της διαδικασίας συσσωμάτωσης, προτείνεται ένα αριθμητικό μοντέλο για τη μαγνητική οδήγηση φαρμάκου σε συγκεκριμένες περιοχές. Η μέθοδος που προτείνεται, προσομοιάζει τη διαδικασία συσσωμάτωσης, την απόκριση των σωματιδίων κάτω από τη συνδυασμένη δράση σταθερού και μεταβλητού μαγνητικού πεδίου, όπως επίσης και την κίνηση των συσσωματωμένων σωματιδίων μέσα σε ρευστό. Οι δυνάμεις που συμπεριλήφθησαν στο υπολογιστικό μοντέλο παρουσιάζονται στο δεύτερο μέρος**.** Η σύγκριση μεταξύ υπολογιστικών και πειραματικών αποτελεσμάτων παρουσιάζεται στο τρίτο μέρος. Τέλος, τα συμπεράσματα παρουσιάζονται στο τέταρτο μέρος του κειμένου αντίστοιχα**.**

2. ΜΕΘΟΔΟΙ

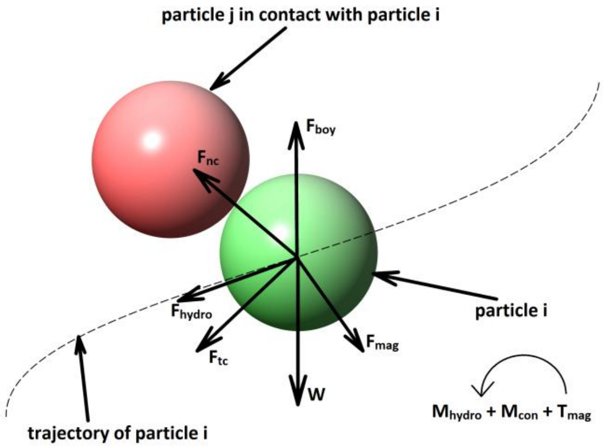
Η υπολογιστική πλατφόρμα περιέχει όλες τις δυνάμεις, οι οποίες δρουν στα σωματίδια και τα κάνουν να κινούνται. Για τον λόγο αυτό, τέσσερις δυνάμεις συμπεριλαμβάνονται στο υπολογιστικό μοντέλο: **α)** οι μαγνητικές δυνάμεις, οι οποίες ασκούνται από τον στατικό μαγνήτη του μαγνητικού τομογράφου και κάνουν τα σωματίδια να συμπεριφέρονται σαν δίπολα, να έλκονται μεταξύ τους και να δημιουργούν συσσωματώματα. Επίσης, συμπεριλαμβάνονται οι μεταβλητές μαγνητικές δυνάμεις, οι οποίες ασκούνται από τα ειδικά βαθμωτά πηνία του μαγνητικού τομογράφου και χρησιμοποιούνται για την κίνηση των συσσωματωμάτων, **β)** η οπισθελκούσα δύναμη για κάθε σφαιρικό σωματίδιο, **γ)** οι δυνάμεις επαφής μεταξύ σωματιδίων και τοιχωμάτων και **δ)** οι βαρυτικές δυνάμεις και οι δυνάμεις άνωσης.

Η κίνηση των σωματιδίων δίνεται από τις εξισώσεις του Νεύτωνα:

$$m_i \frac{\partial \boldsymbol{u}_i}{\partial t} = \boldsymbol{F}_{mag\_i} + \boldsymbol{F}_{nc\_i} + \boldsymbol{F}_{tc\_i} + \boldsymbol{F}_{hydro\_i} + \boldsymbol{F}_{boy\_i} + \boldsymbol{W}_i \quad (1)$$

$$\boldsymbol{I}_i \frac{\partial \boldsymbol{\omega}_i}{\partial t} = \boldsymbol{M}_{drag\_i} + \boldsymbol{M}_{con\_i} + \boldsymbol{T}_{mag\_i} \quad (2)$$

Ο δείκτης i αναφέρεται στο σωματίδιο i. Όλες οι ποσότητες, οι οποίες βρίσκονται στις εξισώσεις (1) και (2) απεικονίζονται στο σχήμα 1. Οι έντονες μεταβλητές αντιστοιχούν στα διανύσματα.



Σχήμα 1: Δυνάμεις και ροπές ενος σωματιδίου.

Στο παρακάτω μέρος, οι δυνάμεις, οι οποίες συμπεριλαμβάνονται στο υπολογιστικό μοντέλο περιγράφονται λεπτομερώς.

2.1 Δυνάμεις που δρούν στα σωματίδια

i) Μαγνητικές Δυνάμεις : Οι μαγνητικές δυνάμεις $\mathbf{F}_{mag\_i}$ που ασκούνται στο σωματίδιο i δίνονται από :

$$\boldsymbol{F}_{mag\_i} = \boldsymbol{F}_{intmag\_i} + \boldsymbol{F}_{ismag\_i} \quad (3)$$

$\mathbf{F}_{intmag\_i}$ είναι η μαγνητική δύναμη που αναπτύσσεται, εξαιτίας της αλληεπίδρασης του i σωματιδίου με το μαγνητικό πεδίο. $\mathbf{F}_{ismag\_i}$ είναι οι μαγνητικές δυνάμεις, οι οποίες επενεργούν στο σωματίδιο i, εξαιτίας της αλληλεπίδρασης με τα μαγνητικά σωματίδια που το περιβάλλουν.
Η δύναμη $\mathbf{F}_{intmag\_i}$ δίνεται από:

$$\boldsymbol{F}_{intmag\_i} = V\,(m_i \ \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{B}_{ext\_i} \quad (4)$$

Η δύναμη $\mathbf{F}_{ismag\_i}$ δίνεται από:

$$\boldsymbol{F}_{ismag\_i} = \sum_j^N \boldsymbol{F}_{ismag\_ji} \quad (5)$$

Το αριθμητικό μοντέλο για τις μαγνητικές δυμάμεις δίνεται από [Vartolomaios & Mavroidis (2012)].

ii) Δυνάμεις ρευστού: Η δύναμη οπισθελκούσας δίνεται από:

$$\boldsymbol{F_{drag\_i}} = \frac{1}{2}\rho u^2 C_d A \tag{6}$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού, u είναι η ταχύτητα του σώματος σε σχέση με την ταχύτητα του ρευστού και A είναι η επιφάνεια αναφοράς, η οποία ισούται με πr^2 και r είναι η ακτίνα του σφαιρικού σωματιδίου. C_d είναι ο συντελεστής οπισθελκούσας και δίνεται από:

$$C_d = \frac{24[1+0.15Re^{0.687}]}{Re} \tag{7}$$

όπου Re είναι ο αριθμός Reynolds, ο οποίος βασίζεται στη διάμετρο του σωματιδίου.

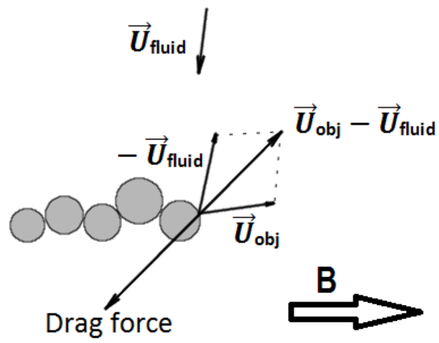
Στην παρούσα εργασία, ένα καινούριο μοντέλο αναπτύχθηκε για την αντικατάσταση της επιφάνειας αναφοράς A στην εξίσωση (6) με την ενεργή επιφάνεια A_{new}. Η αντικατάσταση αυτή λαμβάνει υπόψη της το γεγονός ότι οι μεταγενέστερες σφαίρες βρίσκονται εν μέρει στον απόηχο της άναντη. Γι’ αυτόν τον λόγο, η επιφάνεια αναφοράς A για κάθε σφαίρα στην εξίσωση (6) πρέπει να αντικατασταθεί με την επιφάνεια που πραγματικά έρχεται σε επαφή με το ρευστό.
Ο υπολογισμός της επιφάνειας A_{new} γίνεται με τα παρακάτω βήματα :

(a) Σάρωση όλων των σφαιρών.
(b) Εύρεση της σφαίρας που εφάπτεται στην τρέχουσα υπολογιζόμενη.
(c) Υποθέτουμε ότι το συσσωμάτωμα είναι ευθεία, όπου η σφαίρα (1) εφάπτεται μόνο σε 2 σφαίρες, οι οποίες ονομάζονται 'upwind' και 'downwind'. Η σφαίρα (2), η οποία είναι άναντη της σφαίρας (1), επαληθεύεται από το εσωτερικό γινόμενο $\overrightarrow{\boldsymbol{32}} * (\vec{\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{obj}} - \vec{\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{fluid}})$ όταν αυτό είναι θετικό, όπου $\vec{\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{obj}}$ είναι η ταχύτητα της σφαίρας και $\vec{\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{fluid}}$ είναι η ταχύτητα του ρευστού (βλ. σχήμα 2,3).
(d) Γίνεται προβολή της περιοχής των σφαιρών (2 και 1) στο επίπεδο $\vec{\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{obj}} - \vec{\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{fluid}}$,το οποίο περνά από το κέντρο της σφαίρας 2(βλ. σχήμα 4). Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα τον σχηματισμό δύο κύκλων που τέμνονται (βλ. σχήμα 5).
(e) Γίνεται αλλαγή του συστήματος συντεταγμένων (2D).
(f) Υπολογίζεται η επικαλυπτόμενη περιοχή (βλ. άσπρος τομέας, σχήμα 5). Ο μαθηματικός τύπος για τον υπολογισμό της επικαλυπτόμενης περιοχής είναι ο ακόλουθος :

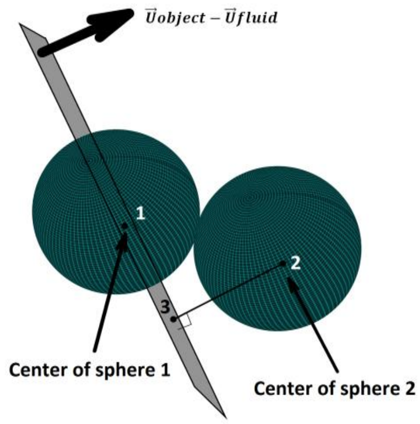
$$E_{overlapping} = domain(234) + domain(134) - E(1234) \tag{8}$$

(g) Αντικατάσταση της εξίσωσης (6) με την εξίσωση:

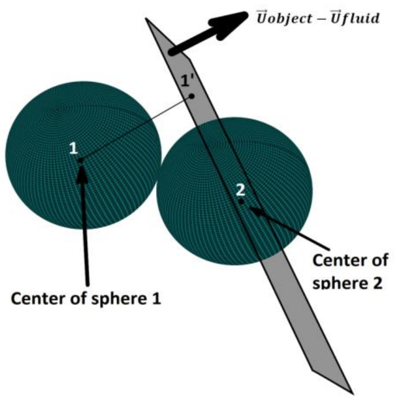
$$\boldsymbol{F_{drag\_i}} = \frac{1}{2}\rho u^2 C_d Anew \tag{9}$$



Σχήμα 2 : Σχετική ταχύτητα και οπισθελκούσα ενός σωματιδίου



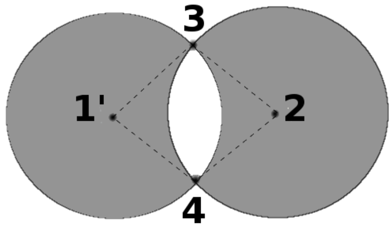
Σχήμα 3 : 3 (X_3,Y_3,Z_3) αντιπροσωπεύει την προβολή της σφαίρας 2 ($X_2Y_2Z_2$) στο επίπεδο $\vec{U}_{obj} - \vec{U}_{fluid}$,το οποίο περνά από το κέντρο της σφαίρας 1 ($X_1Y_1Z_1$).



Σχήμα 4 : 1΄ ($X_{1'}$, $Y_{1'}$,$Z_{1'}$) αντιπροσωπεύει την προβολή του κέντρου της σφαίρας 1 (X_1, Y_1,Z_1) στο επίπεδο $\vec{U}_{obj} - \vec{U}_{fluid}$,το οποίο περνά από το κέντρο της σφαίρας 2 (X_2, Y_2,Z_2).

Με αυτόν τον τρόπο λαμβάνεται υπόψιν η επιφάνεια της σφαίρας A_{new} που έρχεται σε επαφή με το ρευστό :

$$A_{new} = \pi r^2 - E_{overlapping} \qquad (10)$$



Σχήμα 5 : Κυκλικός τομέας δύο σφαιρών

$$E_{overlapping} = domain(234) + domain(134) - E(1234)$$

iii. Δυνάμεις επαφής : Στο υπολογιστικό μοντέλο η προσομοίωση των δυνάμεων επαφής για τον υπολογισμό της κίνησης των σωματιδίων γίνεται με τη χρήση της μεθόδου Discrete Element Method (DEM) [Tijskens et al. (2003)]. Η μέθοδος είναι ικανή να περιγράψει τη συμπεριφορά των συσσωματωμάτων από σφαίρες και να υπολογίσει την κίνηση μεγάλου αριθμού μικρών σωματιδίων.

iv. Δυνάμεις σώματος : Η βαρυτική δύναμη και η δύναμη άνωσης συμπεριλαμβάνονται για τον υπολογισμό της δύναμης σώματος. Η δύναμη δίνεται από:

$$\boldsymbol{F_{grav\_i}} = \boldsymbol{W_i} + \boldsymbol{F_{boy\_i}} = \frac{4}{3}\pi r_i^3(\rho_i - \rho_f)g \qquad (11)$$

όπου $\boldsymbol{\rho_i}$ και $\boldsymbol{\rho_f}$ είναι η πυκνότητα του σωματιδίου i και του ρευστού, αντίστοιχα, r_i η ακτίνα του σωματιδίου i και g η επιτάχυνση της βαρύτητας.

2.2 Μαγνητικό πεδίο και απόσταση αλληλεπίδρασης

Το μαγνητικό πεδίο **B** μέσα στην κλίνη του μαγνητικού τομογράφου δίνεται από :

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B_0} + \widetilde{\boldsymbol{G}} + \boldsymbol{B_1} \qquad (12)$$

όπου B_0 είναι το μαγνητικό πεδίο, το οποίο δημιουργείται από τον μαγνητικό τομογράφο και είναι σταθερό και ομοιογενές. $\widetilde{\boldsymbol{G}}$ είναι το βαθμωτό πεδίο και $\boldsymbol{B_1}$ είναι η συχνότητα, η οποία εξαρτάται από τον χρόνο [Epstein & Wehrli (2005)].

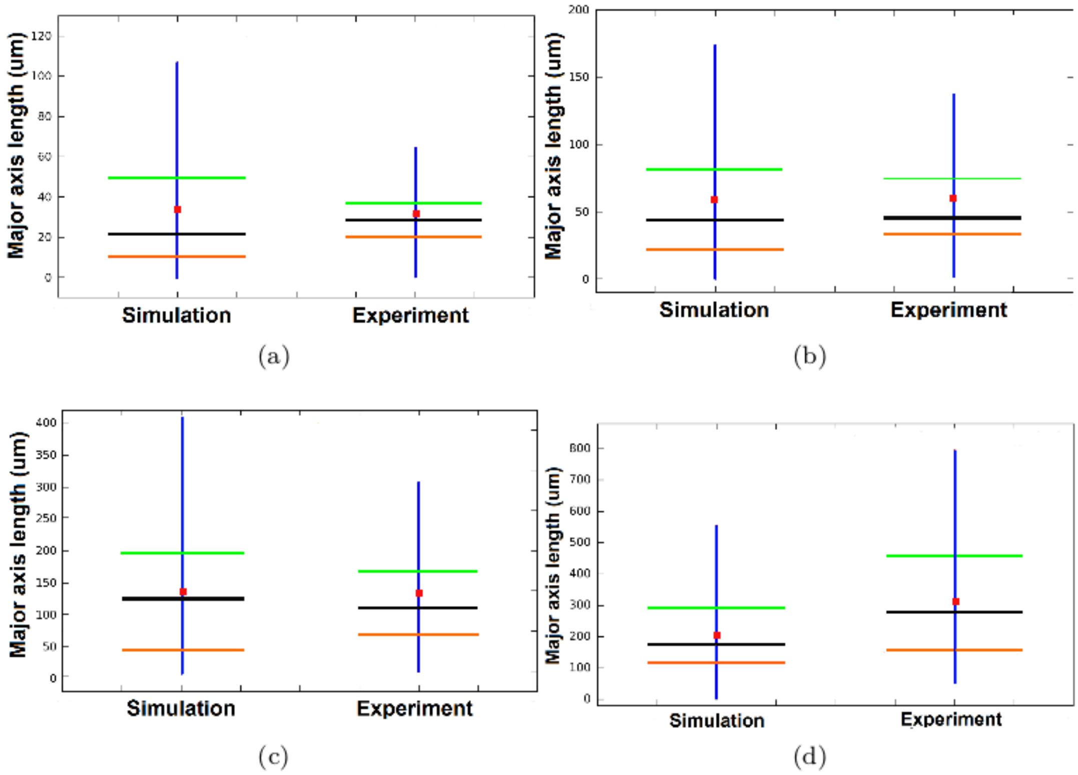
Είναι γνωστό ότι τα μαγνητικά σωματίδια αλληλεπιδρούν με τα γειτονικά τους μέσα σε μια συγκεκριμένη απόσταση. Η απόσταση αυτή ονομάζεται απόσταση αλληλεπίδρασης και εξαρτάται από διάφορους παράγοντες, όπως πχ. την ένταση του μαγνητικού πεδίου [Lampropoulos et al. (2014)]. Για τη μείωση του χρόνου υπολογισμού των μαγνητικών δυνάμεων που ασκούνται σε ένα σωματίδιο, ο κώδικας υπολογίζει μόνο τις μαγνητικές δυνάμεις που δέχεται το σωματίδιο από τα σωματίδια που βρίσκονται εντός της ακτίνας αλληλεπίδρασης. Οι μαγνητικές δυνάμεις που προέρχονται από τα σωματίδια, τα οποία βρίσκονται έξω από την ακτίνα αλληλεπίδρασης, δεν λαμβάνονται υπόψιν στον υπολογισμό της μαγνητικής ροπής του σωματιδίου [Lampropoulos et al. (2014)].

2.3 Αριθμητική μέθοδος

Για τον υπολογισμό του πεδίου ροής χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα OpenFoam. Αρχικά, ο υπολογισμός του πεδίου ροής έγινε με τη χρήση των ασυμπίεστων εξισώσεων Navier-Stokes και με τη μέθοδο PISO. Στη συνέχεια, η κίνηση των σωματιδίων προσομοιώθηκε με τη χρήση της μεθόδου Lagrange. Για την χρονική επίλυση των εξισώσεων χρησιμοποιήθηκε η ρητή μέθοδος του Euler. Το χρονικό βήμα για την εξασφάλιση της σταθερότητας τέθηκε ίσο με 10^{-6} s, ένα χρονικό βήμα που είναι δύο τάξεις μικρότερο σε σχέση με τις αντίστοιχες χρονικές κλίμακες κίνησης των σωματιδίων.

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Σε αυτό το μέρος παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων της υπολογιστικής μεθόδου που αναπτύχτηκε και γίνεται σύγκριση με δύο βασικά πειράματα της βιβλιογραφίας. Η πρώτη σύγκριση αφορά τη διαδικασία συσσωμάτωσης των σωματιδίων, τα οποία βρίσκονται διασκορπισμένα σε απεσταγμένο νερό και τίθενται υπό την επίδραση σταθερού μαγνητικού πεδίου. Η διάμετρος των σωματιδίων είναι 11μm. Τέσσερις διαφορετικές συγκεντρώσεις σωματιδίων (0.563 mg/ml, 1.125 mg/ml, 2.25mg/ml, 4.5mg/ml) προσομοιώθηκαν υπό την επίδραση σταθερού μαγνητικού πεδίου εντάσεως B_0=0.4T. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με πειραματικά δεδομένα της αναφοράς [Mathieu & Martel (2009)] και απεικονίζονται στο σχήμα 6 και στον πίνακα 1.



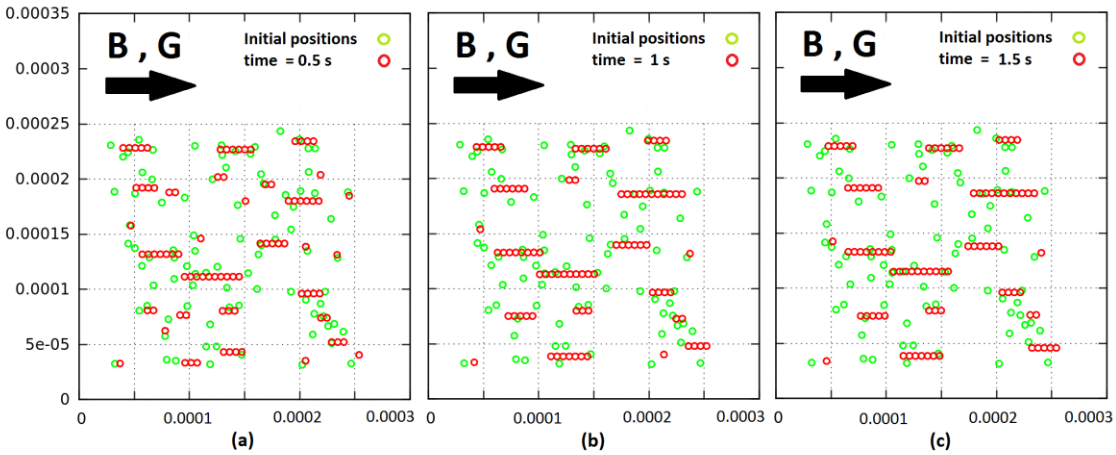
Σχήμα 6 : Μεταβολή μήκους συσσωματωμάτων για διάφορες συγκεντρώσεις (η πορτοκαλί γραμμη αντιπροσωπεύει το κάτω τεταρτημόριο, η πράσινη το πάνω τεταρτημόριο και η μαύρη γραμμή το μέσο. Οι μπλε γραμμές απεικονίζουν το πάνω και κάτω όριο. Οι κόκκινοι κύκλοι αντιπροσωπεύουν το μέσο μήκος των συσσωματωμάτων : a) για συγκέντρωση 0.563mg/ml, b) για συγκέντρωση 1.125 mg/ml, c) για συγκέντρωση 2.25 mg/ml, και d) για συγκέντρωση 4.5mg/ml.

Συγκέντρ. (mg/ml)	Αριθμός σωματιδίων	Μέσο μήκος (um) προσομοίωση	Απόκλιση (um) προσομοίωση	Μέσο μήκος (um) πείραμα	Απόκλιση (um) πειραμα
0.563	311	34.02	23.72	31	16
1.125	385	59.14	43.19	59	36
2.25	1003	140.36	110.45	137	85
4.5	307	201.49	109.42	317	195

Πίνακας 1: Σύγκριση πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων για την πρώτη σειρά προσομοιώσεων.

-	Μέσο μήκος (σωματίδα)	Απόκλιση (σωματίδια)	Μέση ταχύτητα (um/s)	Απόκλιση (um/s)
Πείραμα	7	5	7.5	1
Προσομοίωση	7.63	5.88	8.3	1.4

Πίνακας 2 : Σύγκριση πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων για τη δεύτερη σειρά προσομοιώσεων.



Σχήμα 7: Αρχικές θέσεις (πράσινοι κύκλοι). Μετατόπιση σωματιδίων (a) από t =0s σε t = 0.5s, (b) από t =0s σε t = 1s, (c)) από t =0s σε t = 1.5s

Η δεύτερη σειρά προσομοιώσεων έγινε υπό τη συνδυασμένη επίδραση σταθερού B_0= 0.005T και μεταβλητού μαγνητικού πεδίου G = 1.4T. Το μέγεθος των σωματιδίων και η συγκέντρωση που προσομοιώθηκε είναι 5.5μm και 25mg/ml, αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με πειραματικά δεδομένα της αναφοράς από [Vartolomaios & Mavroidis (2012)] και παρουσιάζονται στον πίνακα 2.

4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στη συγκεκριμένη εργασία παρουσιάστηκε μια υπολογιστική μέθοδος για τη μαγνητική οδήγηση σωματιδίων επικαλυμμένων με φάρμακο για την καταπολέμηση καρκινικών όγκων. Σκοπός της μεθόδου είναι η προσομοίωση της διαδικασίας συσσωμάτωσης των σωματιδίων, καθώς επίσης και η εξακρίβωση της ταχύτητας των συσσωματωμάτων μέσα σε ένα ρευστό περιβάλλον. Η σύγκριση των υπολογιστικών και πειραματικών αποτελεσμάτων έδειξε ότι η μέθοδος που αναπτύχθηκε μπορεί να προσομοιώσει ικανοποιητικά τα πειραματικά δεδομένα. Ειδικότερα, η προτεινόμενη υπολογιστική μέθοδος μπορεί να προσομοιώσει με μικρή απόκλιση το μέσο μήκος των συσσωματωμάτων υπό την επίδραση σταθερού μαγνητικού πεδίου όταν υπάρχει ικανός αριθμός προσομοιωμένων σωματιδίων. Επίσης, υπό την επίδραση σταθερού και μεταβλητού μαγνητικού πεδίου προσομοιώνει με μικρή διαφορά την ταχύτητα που αποκτούν τα συσσωματώματα. Στην πρώτη περίπτωση, η διαδικασία συσσωμάτωσης ολοκληρώνεται σε 5 ms, ενώ στη δεύτερη, όπου το μαγνητικό πεδίο είναι πολύ μικρότερο, σε ένα δευτερόλεπτο και στη συνέχεια τα συσσωματώματα αρχίζουν να κινούνται ανάλογα με την κλίση του μαγνητικού πεδίου (βλ. σχήμα 7). Ο χρόνος προσομοίωσης αυξάνεται με την αύξηση των σωματιδίων που προσομοιώνονται, καθώς δημιουργούνται μεγαλύτερα συστήματα για την επίλυση των μαγνητικών ροπών των σωματιδίων.

Αναφορές

Epstein C. L. and Wehrli F. W. (2005) Magnetic resonance imaging. [Online]. Available: http://www.math.upenn.edu.

Lampropoulos N. K., Karvelas E.G and Sarris I.E. "Computational study of the particles interaction distance under the influence of steady magnetic field," J. of Advances in Systems Science and Applications, in press (2014).

Lampropoulos N.K., Karvelas E. G. and Sarris I. E. Computational modeling of an MRI guided drug delivery system based on magnetic nanoparticle aggregations for the navigation of paramagnetic nanocapsules, 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCMXI) (Barcelona, 2014).

Llandro J., Palfreyman J.J., Ionescu A. and Barnes C. H. W., "Magnetic biosensor technologies for medical applications: a review," Med. Biol. Eng. Comput., vol. 48, pp. 977-998 (2010).

Mathieu J.-B. and Martel S., "Aggregation of magnetic microparticles in the context of targeted therapies actuated by a magnetic resonance imagingsystem," J. Appl. Phys., vol. 106, p. 044904 (2009).

Senyei A., Widder K. and Czerlinski C., "Magnetic guidance of drug carrying microspheres," Appl. phys., vol. 49, pp. 3578-83 (1978).

Tijskens E., Ramon H., and Baerdemaeker J., "Discrete element modeling for process simulation in agriculture," J. of Sound and Vibration, vol. 266,pp. 493-514 (2003).

Vartholomeos P. and Mavroidis C., "In silico studies of magnetic microparticle aggregations in fluid environments for MRI-guided drug delivery," IEEE transactions on biomedical engineering, vol. 59, no. 11, pp. 3028-3038 (2012).

Widder K., Marino P., Morris R., and Senyei A., In: Targeted Drugs, Goldberg E (Ed.). NY, USA: John Wiley and Sons (1983).

COMPUTATIONAL MODELLING OF AN MRI MAGNETIC DRUG DELIVERY SYSTEM BASED ON SPHERICAL MICROPARTICLES

Abstract : A computational method for magnetically guided drug delivery is presented, and the results are compared for the aggregation process of magnetic particles within a fluid environment. The model is developed for the simulation of the aggregation patterns of magnetic particles under the influence of MRI magnetic coils. A novel approach for the calculation of the drag coefficient of aggregates is presented. The comparison against experimental and numerical results from the literature shows that the proposed method predicts well the aggregations with respect to their size and pattern dependance, on the concentration and the strength of the magnetic field, as well as their velocity when particles are driven through the fluid by magnetic gradients.

Μετάβαση από διφασική ροή τύπου πυρήνα-δακτυλίου σε ροή σταγονιδίων, παλλόμενη ροή ή ροή διακριτών φάσεων.

Δ. Φραγγεδάκης, Γ. Δημακόπουλος και Γ. Τσαμόπουλος

Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Εργαστήριο Μηχανικής Ρευστών και Ρεολογίας, Πανεπιστήμιο Πατρών 26054 Πάτρα

e-mail: dimfraged@gmail.com, dimako@chemeng.upatras.gr, tsamo@chemeng.upatras.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Διφασικές ροές εμφανίζονται σε αρκετές διεργασίες της χημικής βιομηχανίας, της βιομηχανίας πετρελαιοειδών, καθώς και στην μικρορευστομηχανική, όπως, για παράδειγμα, στην βελτιωμένη ανάκτηση του πετρελαίου, την διαδικασία αναμόρφωσης σε ρευστοστερεές κλίνες και στην δημιουργία γαλακτωμάτων σε μικροσυσκευές. Το διφασικό σύστημα είναι είτε δύο υγρά ή αέριο και υγρό που ρέουν ταυτόχρονα σε έναν αγωγό. Σε όλες τις περιπτώσεις, η διαμόρφωση της κοινής διεπιφάνειας των δύο φάσεων παίζει σημαντικό ρόλο στους μηχανισμούς μεταφοράς ορμής συμπεριλαμβανομένης της απαιτούμενης πτώσης πίεσης για την κάθε διαμόρφωση, θερμότητας και μάζας και επίσης ελέγχει τον τύπο ροής που μπορεί να προκύψει, ανάλογα με τις φυσικές ιδιότητες του συστήματος.

Αρκετές πειραματικές και θεωρητικές μελέτες έχουν διεξαχθεί προκειμένου να προβλέψουν τα καθεστώτα ροής, αλλά καμία από αυτές δεν ήταν σε θέση να προβλέψει το σύνολο ροών που μπορούν να προκύψουν λόγω των διαφορετικών διεπιφανειακών και άλλων μηχανισμών. Στην παρούσα εργασία, προβλέπουμε την μετάβαση από διαμόρφωση τύπου πυρήνα-δακτυλίου σε ροή διακριτών φάσεων, ροή σταγονιδίων, ροή ψεκασμού ή παλλόμενη ροή. Αυτό επιτυγχάνεται λύνοντας τις μεταβατικές εξισώσεις NS σε συνδυασμό με την μέθοδο όγκου ρευστού (Volume-of-Fluid) που μας επιτρέπει την ακριβή περιγραφή των περίπλοκων τοπολογικών μεταβολών της διεπιφάνειας. Προσομοιώνουμε την αξονοσυμμετρική ροή δύο μη αναμίξιμων υγρών ίδιας πυκνότητας σε ένα ημιτονοειδώς μεταβαλλόμενο σωλήνα, οδηγούμενη από μια εξωτερικά εφαρμοζόμενη πτώση πίεσης.

Αρχικά, γίνεται παραμετρική ανάλυση της ροής βασισμένη στους αριθμούς Reynolds και Weber, τον λόγο των ιξωδών και των όγκων των δύο ρευστών και το λόγο της μέγιστης ως προς την ελάχιστη ακτίνα του σωλήνα. Ενδεικτικά παρατηρούμε πως όταν το περισσότερο ιξώδες ρευστό αρχικά καταλαμβάνει την εξωτερική περιοχή του αγωγού (εξωτερικός δακτύλιος) στο εύρος $10<Re<400$ για $We = 1$, η διεπιφάνεια κινείται κοντά στο τοίχωμα δημιουργώντας ένα λεπτό υμένιο εξωτερικού ρευστού. Όταν ο Re ξεπεράσει τη τιμή 500, παρατηρείται διαβροχή του τοιχώματος από την αρχικά εσωτερική φάση, δημιουργώντας σταγόνες του εξωτερικού ρευστού στον πυρήνα του αγωγού. Αυτό προκύπτει από τις έντονες ταλαντώσεις της διεπιφάνειας λόγω της μεγάλης πτώσης πίεσης κατά μήκος του αγωγού. Όταν ο λόγος των όγκων των ρευστών μειωθεί και σε συνδυασμό με την μεγάλη επιφανειακή τάση, ευνοείται η δημιουργία μεγάλων σταγόνων οδηγώντας σε ροή διακριτών φάσεων.

Τέλος, κατασκευάσαμε δισδιάστατες απεικονίσεις (χάρτες) για την οριοθέτηση των καθεστώτων ροής για διάφορες τιμές των παραμέτρων. Οι χάρτες έχουν ως άξονες τους αριθμούς Reynolds και Weber.

Λέξεις Κλειδιά: Διφασική Ροή, VOF, Μικρορευστομηχανική, Καθεστώτα Ροής, Αδιάστατοι Χάρτες Καθεστώτων Ροής

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα διφασικά συστήματα υγρού-υγρού και υγρού-αερίου παρουσιάζουν φαινόμενα τα οποία σχηματίζουν έναν πλούσιο διεπιστημονικό τομέα. Οι εφαρμογές που προκύπτουν περιλαμβάνουν την παραγωγή πολυ-συστατικών υλικών και πολυεπίπεδων υμένων, όπως γαλακτώματα και μείγματα πολυμερών (Shum et al., 2010), την κινητοποίηση και ροή μεγάλων σταγόνων πετρελαίου σε τριχοειδή αγγεία με νερό για την βελτιωμένη ανάκτηση πετρελαίου στην βιομηχανία πετρελαίου (Olbricht, 1996), την λίπανση αγωγών αργού πετρελαίου με την προσθήκη νερού (Joseph et al., 1997), την ψύξη σε τελευταίας τεχνολογίας μικροτσίπ μέσα σε πολύ μικρούς όγκους (Stone et al., 2004), τις καταλυτικές διαδικασίες σε πολυφασικούς αντιδραστήρες (Jo & Revankar, 2009), και τις διεργασίες μεταφοράς σε βιολογικά συστήματα όπως την ανάλυση DNA και την κυτταρική ενθυλάκωση (Gunther & Jensen, 2006). Οι τελικές ιδιότητες και η δυνατότητα εφαρμογής των πολυφασικών συστημάτων επηρεάζονται σε μεγάλο βαθμό από τις βαρυτικές, τις αδρανειακές, τις διεπιφανειακές και τις ιξώδεις δυνάμεις και από την κατεύθυνση της ροής (κάθετος ή οριζόντιος αγωγός). Η αλληλεπίδρασή τους προκαλεί την εμφάνιση ασταθειών ροής, πλούσιων σε δυναμική. Η ποικιλία στα καθεστώτα ροής που μπορούν να προκύψουν επηρεάζει κυρίως την αποτελεσματικότητα και τη λειτουργικότητα της εφαρμογής στην οποία αυτά λαμβάνουν χώρα. Τα καθεστώτα ροής γίνονται πιο περίπλοκα όταν γεωμετρικές περιπλοκότητες γίνονται πιο αισθητές, π.χ. πολυφασικές ροές σε πορώδη μέσα.

Όταν τα διφασικά συστήματα αποτελούνται από υγρό-αέριο, τα καθεστώτα ροής διακρίνονται σε bubbly, slug ή Taylor, churn, rivulet, wavy annular, annularαναλόγως με το εάν η αέρια φάση είναι συνεχής ή διασπειρόμενη και εάν η διεπιφάνεια είναι ομαλή ή κυματιζόμενη. Οι αλλαγές φάσης μπορούν να περιγραφούν με τη χρήση χαρτών ροής όσον αφορά την ορμή του αερίου και του υγρού. Δύο κορυφαία παραδείγματα τέτοιων χαρτών είναι εκείνα των Baker (1954) και Hewitt & Roberts (1969), τα οποία βασίζονται σε πειραματικά δεδομένα και αφορούν ροές σε οριζόντιους και κάθετους αγωγούς μεγάλης διαμέτρου, αντίστοιχα.

Από την άλλη πλευρά, ο αριθμός των μελετών που σχετίζονται με την χαρτογράφηση διφασικών συστημάτων υγρού-υγρού είναι σημαντικά περιορισμένος, λόγω της αυξημένης ευαισθησίας των διαμορφώσεων της διεπιφάνειας και της εγγενούς δυσκολίας του ελέγχου τους. Η τελευταία προκαλείται από την εξάρτηση του καθεστώτος ροής από τις πειραματικές παραμέτρους όπως: τη γραμμική ταχύτητα, την αναλογία όγκων των δύο ρευστών, τη γεωμετρία και το υλικό κατασκευής του αγωγού που συμβαίνει η ροή. Κοινό στοιχείο των εργασιών αυτών είναι ότι οι χάρτες καθεστώτων ροής εκφράζονται με τις μέσες ταχύτητες των δύο φάσεων και το κλάσμα όγκου μιας από τις δύο φάσεις (Angeli & Hewitt (2000), Al-Wahaibi and Angeli (2007); Fukano and Kariyasaki (1989); Tsaoulidis et al. (2013). Όμως αυτές οι απεικονίσεις δεν μπορούν να αποδώσουν κατάλληλα τις συνεισφορές όλων των παραγόντων, καθιστώντας σημαντική τη χρήση αδιάστατων διαγραμμάτων (Zhao et al. (2006); Dessimoz et al. (2008), Foroughi and Kawaji, (2011)).

Οι ανωτέρω εργασίες, ανεξάρτητα από το είδος της ροής που μελετούν, αφορούν μόνο χαρτογράφηση των καθεστώτων σε κανονικές γεωμετρίες ή διακλαδωμένους αγωγούς. Δε μελετούν ή συζητούν την επίδραση της γεωμετρίας εκτός από τον προσανατολισμό του αγωγού. Η μελέτη των γεωμετρικών αποτελεσμάτων θεωρείται ως ένα πολύ δύσκολο έργο, λόγω του αυξημένου ανταγωνισμού μεταξύ των καθεστώτων ροής.

Η παρούσα μελέτη αφορά την αλλαγή των καθεστώτων ροής που εμφανίζει η διφασική ροή δύο υγρών. Αρχικά, η διεπιφάνεια έχει ορισθεί παρόμοια με αυτή του τέλειου πυρήνα-δακτυλίου ενός κυκλικού αγωγού με ημιτονοειδείς μεταβολές στη διατομή του. Πιο συγκεκριμένα, εξετάζουμε την επίδραση των αριθμών Reynolds και Weber, τους λόγους ιξωδών και όγκων των δύο ρευστών στον αγωγό με βάση το σχήμα της κοινής διεπιφάνειας και την ταχύτητα που εμφανίζονται οι αλλαγές των καθεστώτων ροής, κάτι που δεν έχει επιλυθεί ακόμη. Ένας δεύτερος στόχος της παρούσας εργασίας είναι η κατασκευή γενικών χαρτών καθεστώτων ροής που περιγράφουν τις περιοχές διαφορετικής διαμόρφωσης με μεγάλη ακρίβεια όσον αφορά τους αριθμούς Reynolds και Weber, οι οποίοι ορίζονται με βάση την εξωτερικά επιβαλλόμενη πτώση πίεσης.

2. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΚΑΙ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ

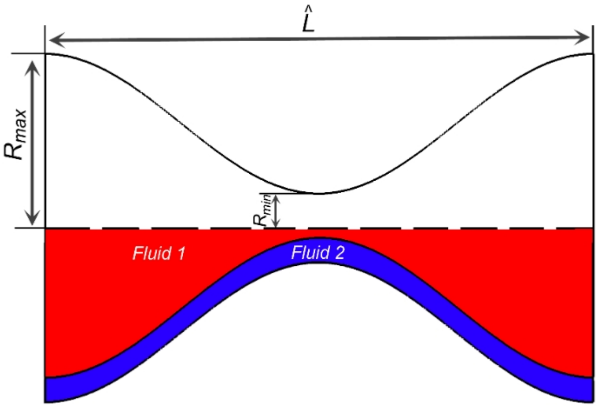
2.1 Περιγραφή Προβλήματος

Θεωρούμε την αξονοσυμμετρική ροή δύο μη-αναμίξιμων Νευτώνειων ρευστών προκαλούμενη από μια εξωτερικά εφαρμοζόμενη πτώση πίεσης, $\hat{f}$. Το φυσικό πεδίο που πραγματοποιείται η ροή είναι ένας περιοδικά μεταβαλλόμενος αγωγός με ημιτονοειδές προφίλ. Ο αγωγός είναι αξονοσυμμετρικός και η ακτίνα του μεταβάλλεται σε μια αξονική απόσταση, $\hat{L}$, μεταξύ μιας μέγιστης, $\hat{R}_{max}$, και μιας ελάχιστης τιμής, $\hat{R}_{min}$, σχήμα (1). Ως χαρακτηριστικό μήκος για την αξονική και ακτινική κατεύθυνση αντίστοιχα θεωρούμε την μέγιστη ακτίνα του αγωγού. Η αδιάστατη ακτίνα του αγωγού εκφράζεται με την ακόλουθη συνάρτηση:

$$R(z)=\frac{1+\alpha}{2}+\frac{1-\alpha}{2}\cos(2\pi\frac{z}{\Lambda}), 0\le z\le\Lambda \tag{1}$$

όπου a δηλώνει το λόγο στένωσης του αγωγού, $a=\frac{\hat{R}_{min}}{\hat{R}_{max}}$, Λ δηλώνει την αναλογία μήκους προς μέγιστη ακτίνα της γεωμετρίας, $\Lambda=\frac{\hat{L}}{\hat{R}_{max}}$.

Η εσωτερική περιοχή του αγωγού είναι γεμάτη με το πρώτο ρευστό με σταθερή πυκνότητα και ιξώδες, $(\hat{\rho}_1,\hat{\mu}_1)$, και η εξωτερική περιοχή περιέχει το δεύτερο ρευστό με σταθερές ιδιότητες, $(\hat{\rho}_2,\hat{\mu}_2)$.



Σχήμα 1. Γεωμετρική αναπαράσταση αγωγού με ημιτονοειδώς μεταβαλλόμενη διατομή γεμάτο με δύο μη αναμίξιμα ρευστά.

Η διεπιφανειακή τάση του συστήματος των δύο ρευστών συμβολίζεται με $\hat{\gamma}$. Οι φυσικές ιδιότητες κάθε φάσης μετρώνται με βάση την πυκνότητα και το ιξώδες του εσωτερικού ρευστού, ενώ η κλίμακα για το πεδίο ταχύτητας είναι $\left(\frac{\hat{f}\hat{R}_{max}}{\hat{\rho}_1}\right)^{0.5}$, για τη χρονική μεταβλητή είναι ~~με~~ $\left(\frac{\hat{\rho}_1\hat{R}_{max}}{\hat{f}}\right)^{0.5}$ και για την πίεση όπως και το πεδίο ιξωδών τάσεων είναι ~~με~~ $\left(\hat{R}_{\max}\hat{f}\right)$. Έτσι οι αδιάστατοι αριθμοί που προκύπτουν είναι ο λόγος πυκνοτήτων, ο λόγος ιξωδών, ο αριθμός Reynolds και ο αριθμός Weber που ορίζονται ως:

$$\mu^o=\frac{\hat{\mu}_2}{\hat{\mu}_1},\ \rho^o=\frac{\hat{\rho}_2}{\hat{\rho}_1} \tag{2}$$

$$Re=\frac{\hat{R}_{\max}\left(\hat{\rho}_1\hat{f}\hat{R}_{\max}\right)^{0.5}}{\hat{\mu}_1},\ We=\frac{\hat{f}\hat{R}_{\max}{}^2}{\hat{\gamma}} \tag{3}$$

Η ροή κάθε ρευστού υπακούει στην διατήρηση ορμής και μάζας σε κυλινδρικές συντεταγμένες, που σε αδιάστατη μορφή είναι:

$$\rho\partial_t\left(\underline{u}\right)+\rho\underline{\nabla}\cdot\left(\underline{u}\underline{u}\right)=-\underline{\nabla}P+\frac{1}{\mathrm{Re}}\underline{\nabla}\cdot\left(2\mu\underline{\underline{D}}\right)+\frac{1}{We}\Phi_{st}, \quad (4)$$

$$\underline{\nabla}\cdot\underline{u}=0, \quad (5)$$

Με $\underline{\nabla}$ συμβολίζεται ο τελεστής βαθμίδας στις κυλινδρικές συντεταγμένες, $\underline{\nabla}(\cdot)=e_r\partial_r(\cdot)+\mathrm{e}_\theta\frac{\partial_\theta}{r}(\cdot)+e_z\partial_z(\cdot)$, $\underline{u}=u_r\underline{e}_r+0\underline{e}_\theta+u_z\underline{e}_z$ και P είναι το αξονοσυμμετρικό διάνυσμα ταχύτητας και η πίεση αντίστοιχα, όπου $\underline{e}_r,\underline{e}_\theta,\underline{e}_z$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα σχετιζόμενα με το κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων $\left(r,\theta,z\right)$ και Φ_{st} δηλώνει τις τριχοειδείς δυνάμεις. Ακόμη, $\underline{\underline{D}}$ δηλώνει τον τανυστή του ρυθμού παραμόρφωσης, που στα Νευτώνεια ρευστά εκφράζεται ως:

$$\underline{\underline{D}}=\frac{1}{2}\left(\left(\underline{\nabla}\underline{u}\right)+\left(\underline{\nabla}\underline{u}\right)^{\mathrm{T}}\right) \quad (6)$$

Στο τοίχωμα του κυματοειδούς αγωγού θεωρούμε τις συνήθεις συνθήκες μη ολίσθησης και μη διείσδυσης:

$$u_r=0,\ \ u_z=0. \quad (7)$$

Το ημιτονοειδές προφίλ του αγωγού, μας επιτρέπει να θεωρήσουμε περιοδικότητα μεταξύ των σημείων εισόδου και εξόδου σε αυτόν για το πεδίο ταχύτητας αλλά και για τις παραγώγους τους ως προς την αξονική διεύθυνση. Εφόσον η ροή επάγεται από μια σταθερή πτώση πίεσης, είναι βολικό να αναλύσουμε το αδιάστατο πεδίο πίεσης, P σε ένα περιοδικό κομμάτι και σε ένα σκέλος που μεταβάλλεται γραμμικά κατά μήκος της αξονικής κατεύθυνσης, δηλαδή:

$$P=p-z. \quad (8)$$

2.2 Αριθμητική επίλυση

Οι μεταβλητές των ταχυτήτων, πίεσης και τάσεων διακριτοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας την μέθοδο των κεντρικών πεπερασμένων διαφορών, σε συνδυασμό με ένα μετασχηματισμό που προσαρμόζεται στη γεωμετρία του αγωγού και την μέθοδο Volume-of-Fluid που μπορεί και ακολουθεί την κίνηση της διεπιφάνειας των δύο ρευστών. Η εκδοχή της μεθόδου Volume-of-Fluid που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία βασίζεται στην γεωμετρική αναπαράσταση της διεπιφάνειας μέσω μιας γραμμικής προσέγγισης σε κάθε κελί διακριτοποίησης (PLIC).

Ο μετασχηματισμός του χώρου είναι αυτός που προτάθηκε από (Zacharioudaki et al., 2006):

$$x=\frac{r}{R(\mathrm{z})},\ y=z,\ \tau=t \quad (9)$$

Η χρήση του ανωτέρω μετασχηματισμού έγινε με σκοπό την σωστή εφαρμογή συνοριακών συνθηκών, μιας και το τοίχωμα του αγωγού μεταβάλλεται ημιτονοειδώς στην αξονική διεύθυνση. Η αριθμητική ολοκλήρωση έγινε με την μέθοδο αναλυτής Euler σε συνδυασμό με μεταβαλλόμενο χρονικό βήμα (Dimakopoulos et al. 2012) με βάση το σφάλμα του περιορισμού ασυμπιεστότητας:

$$\Delta\tau_{n+1}=\Delta\tau_n\left(\frac{\varepsilon}{\left\|\underline{d}_n\right\|}\right)^{0.25}, \quad (10)$$

Ο περιορισμός ασυμπιεστότητας εφαρμόζεται μέσω της μεθόδου προβολής της πίεσης, όπως προτάθηκε από τον (Chorin 1967) και έχει τη μορφή:

$$\underline{u}_{n+1}=\underline{u}_{n+1}^{*}-\frac{\Delta\tau}{\rho}\underline{\nabla}\left(\Delta p_n\right) \quad (11)$$

που $\underline{u}_{n+1}^{*}$ είναι η αναλυτή λύση του διανύσματος ταχύτητας. Αντικαθιστώντας την σχέση (11) στην εξίσωση συνέχειας προκύπτει η γραμμική εξίσωση:

$$R\partial_x\left(\frac{x}{\rho R}\Big(\partial_x(\Delta p)-x\partial_y(R)\big(\partial_y(R\Delta p)-\partial_y(R)\partial_x(x\Delta p)\big)\Big)\right)+x\partial_y\left(\frac{R}{\rho}\Big(\partial_y(R\Delta p)-\partial_y(R)\partial_x(x\Delta p)\Big)\right)$$
$$=R\partial_x\left(x\left(u^*_{r_{n+1}}-x\partial_y(R)u^*_{z_{n+1}}\right)\right)+x\partial_y\left(R^2(y)u^*_{z_{n+1}}\right) \qquad (12)$$

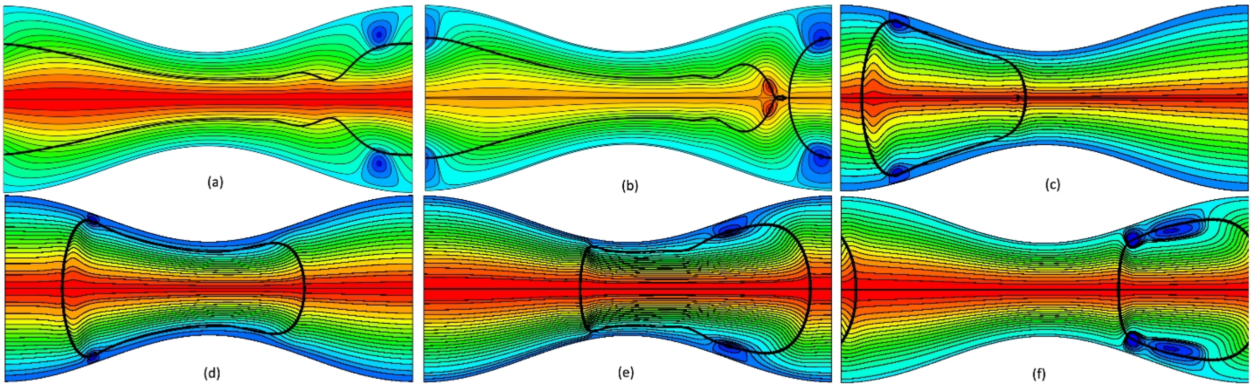
Το γραμμικό σύστημα που προκύπτει από την διακριτοποίηση της πίεσης με κεντρικές πεπερασμένες διαφορές λύνεται με την χρήση του PARDISO, έναν άμεσο και ισχυρό επιλυτή πινάκων, (Schenk and Gärtner 2004; Schenk and Gärtner 2006).

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ/ΣΥΖΗΤΗΣΗ

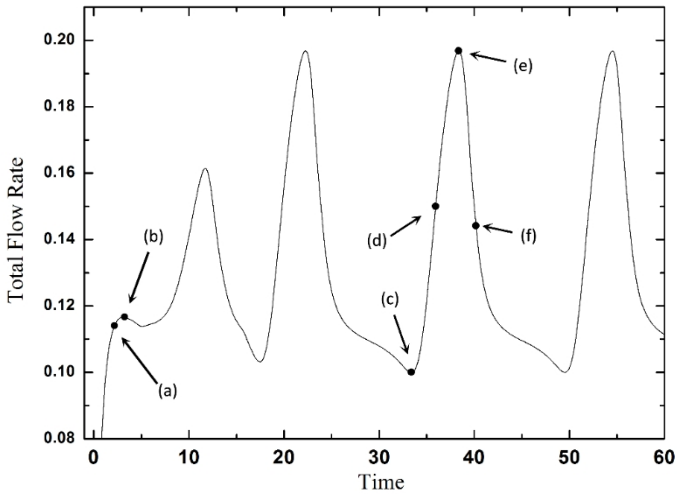
3.1 Τμηματική ροή

Προηγούμενες εργασίες (Kuhn et al., 2011) έχουν αναφέρει ως τμηματικό ροϊκό πεδίο τις περιπτώσεις που είναι παρόντα σταγονίδια ή μεγάλες σταγόνες. Ο όρος αυτός αναφέρεται στα συστήματα υγρού-αερίου και υγρού-υγρού όταν η εσωτερική φάση είναι στην μορφή ξεχωριστών τμημάτων σε σχέση με την συνεχή φάση.

Τα αποτελέσματα του σχήματος (2) προκύπτουν για την περίπτωση που ο λόγος ιξωδών ισούται με 5, το κλάσμα όγκου του εσωτερικού ρευστού με 0.25 και οι αριθμοί Reynolds και Weber με 50 και 1 αντίστοιχα. Η χρονική εξέλιξη της συνολικής ογκομετρικής παροχής απεικονίζεται στο σχήμα (3), και υπολογίζεται στην είσοδο του αγωγού. Η συνολική ογκομετρική παροχή αρχικά αυξάνεται απότομα, και μεγιστοποιείται σε μικρή χρονική περίοδο από την εφαρμογή της σταθερής πτώσης πίεσης. Εστιάζοντας στην συμπεριφορά της διεπιφάνειας στην περιοχή μετά την στένωση, μια διαταραχή στο ροϊκό πεδίο παράγει ένα κύμα στην διεπιφάνεια λόγω της ύπαρξης της στένωσης και της απότομης εκκίνησης της ροής, σχ. (2a). Η επιφανειακή τάση δεν μπορεί να μειώσει την επιφάνεια του εσωτερικού ρευστού απαλείφοντας το σχηματιζόμενο κύμα και έτσι η αύξηση του πλάτους του σχηματιζόμενου κύματος γίνεται ασταθής, οδηγώντας τελικά σε διάσπαση της φάσης του πυρήνα δημιουργώντας μια μεγάλη σταγόνα. Λόγω της περιοδικής φύσης της εφαρμοζόμενης γεωμετρίας, η συνολική ογκομετρική παροχή θα εμφανίζει περιοδική συμπεριφορά επίσης, παίρνοντας την μέγιστη τιμή όταν το λιγότερο ιξώδες ρευστό καταλαμβάνει μεγαλύτερο όγκο στην περιοχή της στένωσης, σχ. (2e). Το ελάχιστο πλάτος της ταλάντωσης της ογκομετρικής παροχής αντιστοιχεί στο χρονικό διάστημα που η σταγόνα δεν περνά από την διατομή όπου υπολογίζεται η ογκομετρική παροχή, σχ. (2c). Η περιοδική συμπεριφορά της ογκομετρικής παροχής έχει σταθερή περίοδο λόγω της περιοδικής φύσης του προβλήματος. Το ρευστό του πυρήνα έχει δημιουργήσει μια μεγάλη σταγόνα πλήρως περιβαλλόμενη και μεταφερόμενη από την συνεχή φάση του δακτυλίου. Η μέση ογκομετρική παροχή της δημιουργούμενης σταγόνας αποκλίνει από τις προβλέψεις της γραμμικής ανάλυσης των (Kouris & Tsamopoulos, 2001) έχοντας τιμή 7% μικρότερη από αυτή που προβλέπουν οι υπολογισμοί μόνιμης κατάστασης. Η σύγκριση της μόνιμης κατάστασης με τη χρονικά μεταβαλλόμενη αποδεικνύει ότι η λύση μόνιμης κατάστασης είναι συνδεδεμένη με λίγο μεγαλύτερες ογκομετρικές παροχές. Προφανώς, το γεγονός ότι το ρευστό του πυρήνα σχηματίζει μια σταγόνα μεγαλύτερης διαμέτρου από τη μέση ακτίνα της αρχικής κατάστασης στην μορφή τέλειου πυρήνα-δακτυλίου, εξαναγκάζει μέρος αυτής να κινείται μακριά από τον άξονα του αγωγού και από περιοχές που επικρατούν μικρότερες αξονικές ταχύτητες, επιβραδύνοντας τη μέση ταχύτητά της. Αντιθέτως, μέρος του εξωτερικού ρευστού που βρίσκεται στον άξονα συμμετρίας κινείται ταχύτερα από την τέλεια CAF ροή.



Σχήμα 2. Χρονική εξέλιξη του σχήματος της διεπιφάνειας σε χρόνους $(a)\ \tau = 2.21$, $(b)\ \tau = 2.82$, $(c)\ \tau = 33.31$ $(c)\ \tau = 33.31$, $(d)\ \tau = 35.84$, $(e)\ \tau = 38.43$ και $(f)\ \tau = 39.96$. Τα αποτελέσματα αυτά αναφέρονται σε μια χρονική περίοδο. Οι παράμετροι του φυσικού συστήματος αναφέρονται στο σχήμα (3).



Σχήμα 3. Χρονική εξέλιξη της συνολικής ογκομετρικής παροχής, υπολογισμένη στην είσοδο του αγωγού. Φυσικές ιδιότητες $\left(\mu^{o}, Re, We, V\right) = (5,\ 50,\ 1,\ 0.25)$.

Επικεντρώνοντας ξεχωριστά στην δυναμική δημιουργίας και κίνησης της μεγάλης σταγόνας, μπορούμε να δούμε από τα σχήματα (2c-f) την κίνηση της σχηματιζόμενης σταγόνας από το εσωτερικό ρευστό να μεταφέρεται εντός του ημιτονοειδούς αγωγού με ένα περιοδικό μοτίβο στο σχήμα της διεπιφάνειας, προκαλούμενο από την στένωση. Σε κάθε στιγμιότυπο, παρατηρείται η δημιουργία ανακυκλοφορίας, σχήμα (2c/d), βοηθώντας την σταγόνα να παραμορφώνεται για να περάσει μέσα από τη στένωση. Ακόμη, οι σχηματιζόμενες δύνες προεκτείνουν τη σταγόνα όταν φτάσει στην μέγιστη ακτίνα του αγωγού. Το σχήμα (2c) αντιστοιχεί στην ελάχιστη ογκομετρική παροχή. Αυτή η τιμή μπορεί να εξηγηθεί με όρους ενεργειακής απώλειας. Μια σταγόνα λιγότερο ιξώδης από το περικλειόμενο ρευστό, προσπαθεί να περάσει από ένα στενό μονοπάτι. Λόγω της διατήρησης μάζας, το εξωτερικό ρευστό θα κινηθεί δημιουργώντας ένα λεπτό υμένιο μεταξύ της σταγόνας και του τοιχώματος. Το σχήμα (2e) αντιστοιχεί στη μέγιστη ογκομετρική παροχή. Σε αυτό το στιγμιότυπο, η στένωση είναι σχεδόν γεμάτη με το λιγότερο ιξώδες ρευστό. Συνδυάζοντας τη μεγάλη πίεση στο λεπτό υμένιο με την μικρότερη ακτίνα της καμπυλότητας στο οπίσθιο άκρο της σε σχέση με το προπορευόμενο άκρο μπορούμε να αιτιολογήσουμε την επιτάχυνση της σταγόνας έχοντας ως αποτέλεσμα την αύξηση της συνολικής ογκομετρικής παροχής.

Το έργο έγινε υπό την υποστήριξη του προγράμματος «Αριστεία» (FilcoMicra, αριθμός προγράμματος 1918), με την συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής ένωσης.

4. ΑΝΑΦΟΡΕΣ

Al-Wahaibi, T., Angeli, P. 2007 Transition between stratified and non-stratified horizontal oil-water flows. Part I: Stability analysis, Chem. Eng. Sci. 62, 2915 – 2928.

Angeli P, Hewitt GF, 2000, Flow structure in horizontal oil-water flow, Inter. J. Multiphase Flow, Vol: 26, Pages: 1117-1140, ISSN: 0301-9322

Chorin A.J., 1967 A numerical solution for solving incompressible viscous flow problems, J. Comput. Phys. 2, 12.

D. Baker, Simultaneous Flow of Oil and Gas, Oil and Gas J, 53, pp 183-195 (1954).

D. Jo, S.T. Revankar, Bubble mechanisms and characteristics at pore scale in a packed-bed reactor, Chem. Eng. Sci., 64, pp. 3179–3187 (2009).

Dessimoz, A., Cavin, L., Renken, A., Kiwi-Minsker, L., 2008. Liquid–liquid two-phase flow patterns and mass transfer characteristics in rectangular glass microreactors. Chem. Eng. Sci. 63, 4035–4044.

Dimakopoulos, Y. Bogaerds, A.C.B. Anderson, P.D. Hulsen, M.A. Baaijens, F.P.T. 2012 Direct numerical simulation of a 2D-stented aortic heart valve at physiological flow rates, Computer Methods in Biomech. and Biomed. Eng. 15, 1157–1179.

Foroughi, H., Kawaji, M., 2011. Viscous oil–water flows in a microchannels initially saturated with oil: flow patterns and pressure drop characteristics, Int. J. Multiphase Flow 37, 1147–1155.

Fukano T., Kariyasaki A., Kagawa M., 1989 Flow patterns and pressure drop in isothermal gas-liquid concurrent flow in a horizontal capillary tube, ANS Proc. 1989. National Heat Transfer Conference, Philadelphia, 153-161
Gunther A., Jensen K.F., 2006. Multiphase microfluidics: from flow characteristics to chemical and materials synthesis, Lab Chip 6 1487–1503.

H. A. Stone, A. D. Stroock, and A. Ajdari, Engineering flows in small devices: Microfluidics toward a lab-on-a-chip, Ann. Rev. Fluid Mech. 36, 381-411 (2004).

Hewitt, G.F., and Roberts, D.N., Studies of Two-Phase Flow Patterns by Simultaneous X-ray and Flash Photography, AERE-M 2159, HMSO (1969).

Joseph, D.D., Bai, R., Chen, K.P., Renardy, Y.Y., 1997. Core-annular flows. Ann. Rev. Fluid Mech. 29, 65-90.
Kouris Ch. and Tsamopoulos J., 2002, Dynamics of the axisymmetric core-annular flow. II. The less viscous fluid in the core, saw tooth waves, Phys. Fluids, 14 (3), 1011-1029.

Kuhn S., Hartman R.L., Sultana M., Nagy K.D., Marre S., Jensen K.F., 2011. Teflon-coated silicon microreactors: impact on segmented liquid–liquid multiphase flows, Langmuir 27 (10) 6519–6527.

Olbricht, W.L., 1996. Pore-scale prototypes of multiphase flow in porous media. Ann. Rev. Fluid Mech. 28, 187–213.

Schenk, O. Gartner, K. 2004 Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO, J. Future Gen. Comput. Syst. 20, 475–487.

Schenk, O. Gartner, K. 2006 On fast factorization pivoting methods for symmetric indefinite systems, Elec. Trans. Numer. Anal. 23, 158–179.

Shum, H. C. Sauret, A. Fernandez-Nieves, A. Stone, H. A. and Weitz, D. A., 2010, Corrugated interfaces in multiphase core-annular flow Phys. Fluids 22, 082002.

Tsaoulidis, D. Dore, V. Angeli, P. Plechkova , N. V. Seddon, K. R. 2013 Flow patterns and pressure drop of ionic liquid–water two-phase flows in microchannels, Int. J. Multiphase Flow 54, 1-10.

Zacharioudaki, M. Kouris, Ch. Dimakopoulos, Y. Tsamopoulos, J. 2006 A direct comparison between volume and surface tracking methods with a boundary-fitted coordinate transformation and third-order upwinding, J. Comp. Phys. 227, 1428–1469.

Zhao, Y. Chen, G. Yuan, Q. 2006 Liquid–liquid two-phase flow patterns in a rectangular microchannel, AIChE Journal 52, 4052–4060

Transitions from core-annular flow to bubbling, pulsing or spray flow in a periodically constricted circular tube

D. Fraggedakis, Y. Dimakopoulos and J. Tsamopoulos

ABSTRACT

Two-phase flow systems arise extensively in mesoscopic engineering applications such as enhanced oil-recovery and in packed bed reactors. In the last, the flow configurations of the interface play a significant role for the determination of mass and heat transfer coefficients. In chemical reactors, both liquid-liquid and gas-liquid systems exist, where various types of flow may occur, depending on the physical properties of the system. Several experimental and theoretical studies has been conducted in order to predict the flow regimes that occur, but none of them could predict the variety of flows that arise due to different mechanisms. In this computational study we predict the transition from perfectly core-annular flow to bubbling, pulsing or spray flow by solving the transient NS equations coupled with Volume-of-Fluid, which enables the capture of significant topological changes of the interface. We assumed 2D axisymmetric flow of two immiscible fluids driven by an externally imposed constant pressure in a periodically constricted tube.

In the first part of this study we examine the effect of the system, like the dimensionless parameters, Reynolds and Weber, the viscosity and volume ratio of the two fluids and the aspect ratio of the maximum to the minimum radius of the tube. In the first solution family we created, we kept the constriction ratio, viscosity ratio, surface tension and varied inertia, which affects the mean volumetric flow rate and directly the interface positioning. For example, in the range $10<Re<400$ and when the more viscous fluid occupies the outer area, the interface moves near the wall area creating a thin film. When Re exceeds 500 wetting of the wall is observed, signaling the transition from bicontinuous to bubbly flow. The reason for this are the strong oscillations which the interface is imposed due to the high pressure gradient combined with the existence of the constriction. In other configurations where the volume ratio is smaller combined with large surface tension, large droplet formation is favored and pulsing flow is observed.

In the second part of the study, we created general flow regime maps, which describe the phase transition areas with a good resolution. These maps are characterized by the dimensionless parameters of the system, Reynolds and Weber. It is important to notice that all the reported flow maps in the bibliography are based on dimensional quantities, which cannot be generalized in several systems.

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ, ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΚΑΙ ΔΟΚΙΜΑΣΤΙΚΟΣ ΕΛΕΓΧΟΣ ΣΥΣΚΕΥΗΣ ΚΟΙΛΙΑΚΗΣ ΥΠΟΒΟΗΘΗΣΗΣ

Γ. Μουσμούλης, Ν. Πεϊτζίκας, Κ. Βαφειάδης, Α. Τουρλιδάκης
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
Πολυτεχνική Σχολή, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας
Email: atourlidakis@uowm.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τις τελευταίες δεκαετίες παρατηρείται αύξηση του αριθμού κρουσμάτων καρδιακής ανεπάρκειας, κυρίως σε χώρες του ανεπτυγμένου κόσμου. Η μοναδική μόνιμη θεραπεία για ασθενείς είναι αυτή της μεταμόσχευσης καρδιάς. Μόλις τα τελευταία χρόνια προτείνεται μια νέα μέθοδος για την αντιμετώπιση του φαινομένου, αυτή της χρήσης αντλιών κοιλιακής υποβοήθησης (ventricular assist device, VAD). Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η παρουσίαση της διαδικασίας σχεδίασης, της υπολογιστικής ανάλυσης και του πειραματικού ελέγχου μιας αντλίας υποβοήθησης της αριστερής κοιλίας της καρδιάς. Συγκεκριμένα, εφαρμόζοντας τις βασικές αρχές δισδιάστατης σχεδίασης στροβιλομηχανών, αναπτύχθηκε υπολογιστικός κώδικας για τον προκαταρκτικό σχεδιασμό της γεωμετρίας της πτερωτής. Ακολούθως, η πτερωτή βελτιστοποιήθηκε σε τέσσερα στάδια με στόχο την αποφυγή εμφάνισης ανακυκλοφορίας και την ελαχιστοποίησης της στροβιλότητας καθώς και της διάτμησης της ροής. Στη συνέχεια σχεδιάστηκε το σπειροειδές κέλυφος της φυγοκεντρικής αντλίας με βάση τα ίδια κριτήρια και τελικά μελετήθηκε η καταστροφή των ερυθρών αιμοσφαιρίων σε συνάρτηση με τη διάτμηση στην οποία υπόκειται το ρευστό. Για τις ανάγκες της πειραματικής δοκιμής της αντλίας πραγματοποιήθηκε μηχανολογική σχεδίαση της συσκευής και η κατασκευή της με χρήση τρισδιάστατης εκτύπωσης. Τα αποτελέσματα των υπολογιστικών προσομοιώσεων, των πειραματικών δοκιμών και η μεταξύ τους σύγκριση παρουσιάζονται και αναλύονται λεπτομερώς.

Λέξεις Κλειδιά: καρδιακή ανεπάρκεια, συσκευή κοιλιακής υποβοήθησης, φυγοκεντρική αντλία, αιμόλυση, βαθμωτό μέτρο διάτμησης, υπολογιστική ρευστοδυναμική, μηχανολογικός σχεδιασμός στροβιλομηχανών,

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η συνεχής αύξηση κρουσμάτων καρδιακής ανεπάρκειας, έδωσε το έναυσμα για μία διεξοδική έρευνα της επιστημονικής κοινότητας που έχει στόχο την αποτελεσματική αντιμετώπισή της. Με τον όρο καρδιακή ανεπάρκεια εννοείται η αδυναμία της καρδιάς είτε να εφοδιάσει τους ιστούς του σώματος με την απαραίτητη ποσότητα αίματος, είτε να στείλει το αίμα προς τους πνεύμονες προκειμένου να οξυγονωθεί. Σημαντικό μέρος της έρευνας έχει επικεντρωθεί στην σχεδίαση και κατασκευή αντλιών οι οποίες έχουν ως στόχο την υποβοήθηση είτε της αριστερής (LVAD) είτε της δεξιάς (RVAD) είτε και των δύο κοιλιών (BIVAD) της καρδιάς. Η σχεδίαση των συγκεκριμένων αντλιών ακολουθεί τη γενική θεωρία σχεδίασης φυγοκεντρικών στροβιλομηχανών αλλά δίνει ιδιαίτερη έμφαση στην επίτευξη επαρκούς υδραυλικού βαθμού απόδοσης βοηθώντας τη φυσιολογική άντληση αλλά και την ορθή αιμοσυμβατότητα που συνεπάγεται ελάχιστη βλάβη του αίματος. Πιο συγκεκριμένα μια τέτοια συσκευή οφείλει, πέρα από τις συνθήκες παροχής και πίεσης στο σημείο λειτουργίας, να μην παρουσιάζει ανακυκλοφορίες και υψηλή διάτμηση της ροής, να έχει μικρό μέγεθος και βάρος και σχετικά μικρό αριθμό πτερυγίων. Η συσκευή υποβοήθησης της αριστερής κοιλίας που παρουσιάζεται στην παρούσα εργασία σχεδιάστηκε και επιχειρήθηκε να βελτιστοποιηθεί με βάση τα παραπάνω κριτήρια.

Στο πρώτο στάδιο της σχεδίασης υπολογίζεται μια πρώτη προσέγγιση της γεωμετρίας της πτερωτής, μέσω της ανάπτυξης μίας υπολογιστικής διαδικασίας που μεταφράστηκε σε έναν κώδικα Matlab, ο οποίος γράφτηκε βάσει της δισδιάστατης ανάλυσης της ροής στη στρεφόμενη πτερωτή. Στη συνέχεια ορισμένες από τις γεωμετρίες που προκύπτουν από τον παραπάνω κώδικα εισάγονται στο λογισμικό υπολογιστικής ρευστοδυναμικής ANSYS CFX όπου και ακολουθεί η λεπτομερής ανάλυση της ροής. Αποτέλεσμα της διερεύνησης είναι η αξιολόγηση και η τελική επιλογή της αρχικής γεωμετρίας της πτερωτής, η οποία στη συνέχεια βελτιστοποιείται σε τέσσερα στάδια. Στην παρούσα εργασία, το κρισιμότερο κριτήριο της βελτιστοποίησης υπήρξε η προσπάθεια αποφυγής της αιμόλυσης, δηλαδή της καταστροφής των ερυθρών αιμοσφαιρίων του αίματος. Για την ποσοτικοποίηση της αιμόλυσης υπάρχει πλήθος διαφορετικών μοντέλων στη βιβλιογραφία. Η εξίσωση που συναντάται πιο συχνά είναι αυτή που παρουσίασαν οι Giersiepen et al (1990) με τη βοήθεια των Wurzinger et al (1986) και που συνδέει το ρυθμό καταστροφής των ερυθρών αιμοσφαιρίων με το βαθμωτό μέτρο της διάτμησης της ροής και με το χρόνο παραμονής του αίματος κατά τη διέλευσή του μέσα από τη μηχανή. Ακολούθως επιλέγεται το μοντέλο του Bludzuweit (1995) για την προσομοίωση του βαθμωτού μέτρου της διάτμησης.

Το επόμενο βήμα της παρούσας εργασίας ήταν ο δοκιμαστικός έλεγχος της φυγοκεντρικής αντλίας. Για την επίτευξη αυτού του στόχου, πραγματοποιήθηκε ο μηχανολογικός σχεδιασμός της αντλίας, η κατεργασία-κατασκευή της και τέλος η σχεδίαση και η κατασκευή της πειραματικής διάταξης όπου εξετάστηκε η λειτουργία της αντλίας. Ο κύριος στόχος του πειράματος ήταν η μέτρηση της χαρακτηριστικής της αύξησης πίεσης της αντλίας και η σύγκρισή της με τα υπολογιστικά αποτελέσματα που προσέφερε εξαιρετικά ενδιαφέροντα συμπεράσματα και προτάσεις για το μέλλον.

ΥΔΡΟΔΥΝΑΜΙΚΗ ΣΧΕΔΙΑΣΗ

Ο υδροδυναμικός σχεδιασμός μιας φυγοκεντρικής αντλίας αποτελείται από τη σχεδίαση των δύο βασικών της τμημάτων. Το πρώτο είναι η πτερωτή, η οποία αποτελεί το περιστρεφόμενο μέρος της μηχανής και το δεύτερο είναι το κέλυφος, το οποίο είναι το σταθερό της κομμάτι.

Πτερωτή

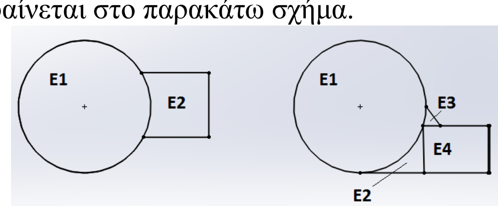
Ως σημείο εκκίνησης για το σχεδιασμό της πτερωτής μιας τέτοιας μηχανής θεωρείται η παροχή και η διαφορά πίεσης που πρέπει να επιτευχθεί για τη μεταφορά του αίματος από την αριστερή κοιλία της καρδιάς στην αορτή. Επομένως η υπολογιστική μέθοδος κάνει χρήση των μαθηματικών σχέσεων που διέπουν τη λειτουργία στροβιλομηχανών και υπολογίζει τους διαφορετικούς συνδυασμούς των γεωμετρικών χαρακτηριστικών και συνθηκών λειτουργίας που μπορούν να πετύχουν την αύξηση πίεσης και την παροχή που είναι επιθυμητές. Έτσι αποκτάται μια πρώτη εικόνα για τα χαρακτηριστικά της πτερωτής της αντλίας. Στον Πίνακα 1 δίνονται τα δεδομένα που εισάγονται στον κώδικα αλλά και η γεωμετρία που τελικά χρησιμοποιείται στην αρχή της βελτιστοποίησης.

Δεδομένα εισόδου		**Αποτελέσματα εξόδου**	
Παροχή μάζας [kg/s]	0.083	Γωνία εισόδου πτερυγίου [°]	81.250
Ύψος [m]	1.630	Γωνία εξόδου πτερυγίου [°]	81.670
Ύψος εξόδου πτερυγίου [mm]	2.000	Περιστροφική ταχύτητα [rpm]	1750.000
Ακτίνα αγωγού εισόδου [mm]	9.525	Ύψος εισόδου πτερυγίου [mm]	3.000
Ακτίνα αγωγού εξόδου [mm]	11.300	Ακτίνα εισόδου πτερυγίου [mm]	12.500
Πυκνότητα ρευστού [kg/m^3]	1000.000	Ακτίνα εξόδου πτερυγίου [mm]	23.500

Πίνακας 1: Δεδομένα εισόδου και αποτελεσμάτων εξόδου της υπολογιστικής διαδικασίας σχεδίασης.

Κέλυφος

Η διάμετρος του βασικού κύκλου καθορίστηκε από τη διατομή της πτερωτής ενώ για τη διανομή των διατομών περιφερειακά ακολουθήθηκε η σχεδίαση με στόχο την επίτευξη σταθερής ταχύτητας του ρευστού. Η απόσταση μεταξύ γλώσσας του κελύφους και της πτερωτής, το πάχος στην είσοδο και η διατομή στην έξοδο του κελύφους καθορίστηκαν με τη μέθοδο δοκιμής και επαλήθευσης. Η μέθοδος είχε ως στόχο την επίτευξη της επιθυμητής διαφοράς πίεσης και τη διατήρηση ομαλής ροής αποφεύγοντας στροβιλισμούς. Τέλος, δυο τύποι κελύφους σχεδιάστηκαν με συμμετρική και εφαπτόμενη διατομής όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



α) β)

Σχήμα 1: α)Συμμετρικό Κέλυφος, β)Εφαπτομενικό Κέλυφος.

ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΑΙΜΟΛΥΣΗΣ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΗΣ ΡΟΗΣ

Αιμόλυση

Για να επιτευχθεί η ποσοτικοποίηση του μεγέθους της αιμόλυσης έχουν προταθεί διάφορες μέθοδοι με επικρατούσα τη *Normalized Index of Hemolysis (NIH)*. Αυτή είναι ανάλογη του ποσοστού καταστροφής της αιμοσφαιρίνης (*ΔHb/ΔH*) μέσω της σχέσης:

$$NIH\left(\frac{g}{100L\ blood}\right) = 100 \cdot \frac{\Delta Hb}{\Delta H}(1 - Hct) \cdot \kappa$$

όπου *Hct* συμβολίζει τον αιματοκρίτη (%) και *κ* είναι η ποσότητα αιμοσφαιρίνης ανά λίτρο αίματος. Το ποσοστό καταστροφής του αίματος σχετίζεται με το χρόνο και το βαθμωτό μέτρο της διάτμησης ως εξής:

$$\frac{\Delta Hb}{\Delta H} = 3{,}62 \cdot 10^{-7} \cdot SSS^{2{,}416} \cdot \Delta t^{0{,}785}$$

Για το βαθμωτό μέτρο της διάτμησης *SSS* χρησιμοποιείται το μοντέλο του Bludszuweit:

$$SSS = \left\{\frac{1}{6}\left[\left(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}\right)^2 + \left(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}\right)^2 + \left(\sigma_{zz} - \sigma_{xx}\right)^2\right] + \left({\tau_{xy}}^2 + {\tau_{yz}}^2 + {\tau_{zx}}^2\right)\right\}^{0.5}$$

με τις ορθές τάσεις στη διεύθυνση x να ορίζονται από τη σχέση:

$$\sigma_{xx} = 2\mu\frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z}\right) + \rho\overline{{U_x}'^2}$$

και τις τάσεις Reynolds από τη σχέση:

$$\rho\overline{{U_x}'^2} = 2\mu_t\frac{\partial U_x}{\partial x}$$

Τέλος η διατμητική τάση τ_{xy} και η αντίστοιχη τάση Reynolds είναι:

$$\tau_{xy} = \mu\left(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x}\right) + \rho\overline{{U_x}'{U_y}'} \qquad \rho\overline{{U_x}'{U_y}'} = \mu_t\left(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x}\right) - \frac{2}{3}\rho k$$

Ανάλυση Ροής κατά Euler

Οι εξισώσεις που περιγράφουν το πεδίο ροής συνεκτικού ρευστού είναι η εξίσωση της συνέχειας και οι εξισώσεις Navier-Stokes, των οποίων η γενική διατύπωση είναι:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{U}) = 0 \qquad \frac{\partial(\rho\boldsymbol{U})}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{U}\otimes\boldsymbol{U}) = -\nabla p + \nabla\cdot\tau + S_M$$

όπου, ***U*** είναι το διάνυσμα της ταχύτητας στις τρεις διευθύνσεις, *ρ* η πυκνότητα του ρευστού, *p* η πίεση και S_M οι όροι δημιουργίας ορμής. Ο τανυστής της τάσης *τ*, δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\tau = \mu\left[\nabla\boldsymbol{U} + (\nabla\boldsymbol{U})^T - \frac{2}{3}\delta\nabla\cdot\boldsymbol{U}\right]$$

όπου, *δ* είναι το δέλτα του Kronecker.

Θεωρώντας ότι η πυκνότητα του εργαζόμενου μέσου παραμένει σταθερή και πως οι παράγοντες ορμής S_M που εισάγονται στη ροή συμπεριλαμβάνουν τις δυνάμεις Coriolis αλλά και τις φυγοκεντρικές δυνάμεις η εξίσωση της ορμής γίνεται:

$$\rho\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}+\rho\nabla(\boldsymbol{U}\otimes\boldsymbol{U})=\nabla\{-p\delta+\mu[\nabla\boldsymbol{U}+(\nabla\boldsymbol{U})^T]\}+S_{Cor}+S_{cfg}$$

Τα περισσότερα μοντέλα τύρβης είναι βασισμένα στον υπολογισμό του τυρβώδους ιξώδους (eddy viscosity) v_t το οποίο καθορίζεται αποκλειστικά και μόνο από τα χαρακτηριστικά της ροής. Στην παρούσα εργασία για το «κλείσιμο» των διεπουσών εξισώσεων χρησιμοποιείται το μοντέλο τύρβης δύο εξισώσεων *k-ε*, το οποίο είναι το πιο διαδεδομένο μοντέλο τύρβης και απαιτεί την επίλυση δύο εξισώσεων που είναι η εξίσωση μεταφοράς για την τυρβώδη κινητική ενέργεια k και η εξίσωση μεταφοράς του ρυθμού σκέδασης ε της τυρβώδους κινητικής ενέργειας.

$$\frac{\partial k}{\partial t}+\frac{\partial(U_j k)}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\nu+\frac{\mu_t}{\rho\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right]+\frac{P_k}{\rho}-\varepsilon+\frac{P_{kb}}{\rho}$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+\frac{\partial(U_j \varepsilon)}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\nu+\frac{\mu_t}{\rho\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right]+\frac{\varepsilon}{k\rho}(C_{\varepsilon 1}P_k\rho-C_{\varepsilon 2}\,\varepsilon+C_{\varepsilon 1}P_{\varepsilon b}\rho)$$

με $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_ε, σ_k σταθερές και P_{kb}, $P_{\varepsilon b}$ να αντιπροσωπεύουν την επιρροή των δυνάμεων άνωσης. Με P_k συμβολίζεται ο ρυθμός παραγωγής τύρβης λόγω των δυνάμεων τριβής, που υπολογίζεται ως εξής:

$$P_k=\mu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j}+\frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)\frac{\partial U_i}{\partial x_j}-\frac{2}{3}\frac{\partial U_k}{\partial x_k}(3\mu_t\frac{\partial U_k}{\partial x_k}+\rho k)$$

Ανάλυση Ροής κατά Lagrange

Από την εξίσωση που περιγράφει το ποσοστό καταστροφής του αίματος, γίνεται κατανοητή η ανάγκη υπολογισμού του χρόνου παραμονής των σωματιδίων του αίματος μέσα στην αντλία. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της παρακολούθησης της κίνησης των σωματιδίων γνωστή και ως *Lagrange particle tracking*, με στόχο την παρακολούθηση της ροής ενός αριθμού σωματιδίων που ελευθερώνονται να ακολουθήσουν τη ροή στην είσοδο της αντλίας και τον υπολογισμό της μέσης διάτμησης και μέσου χρόνου παραμονής αυτών μέσα στη μηχανή.

Η μετατόπιση των σωματιδίων υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την προς τα εμπρός ολοκλήρωση κατά Euler, της ταχύτητας του σωματιδίου στο χρονικό διάστημα δt και ισχύει ότι :

$$x_{pi}^n=x_{pi}^o+v_{pi}^o\delta t$$

όπου οι συμβολισμοί *o* και *n* αναφέρονται σε παλιές και νέες τιμές του μεγέθους αντίστοιχα. Ακόμη v_{pi}^o είναι η αρχική ταχύτητα του σωματιδίου. Στην προς τα εμπρός ολοκλήρωση, η ταχύτητα του σωματιδίου που υπολογίστηκε στην αρχή του χρονικού διαστήματος θεωρείται ότι ισχύει σε όλο το χρονικό διάστημα. Στο τέλος του διαστήματος, η νέα ταχύτητα του σωματιδίου υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την αναλυτική επίλυση της εξίσωσης διατήρησης της ορμής για το σωματίδιο:

$$m_p\frac{dv_p}{dt}=F_{all}$$

με F_{all} το άθροισμα των δυνάμεων που ενεργούν στο σωματίδιο. Τελικά η αναλυτική επίλυση της εξίσωσης της ορμής μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$v_{p=}v_f+\left(v_p^o-v_f\right)\cdot e^{-\frac{\delta t}{\tau}}+\tau\cdot F_{all}\cdot(1-e^{-\frac{\delta t}{\tau}})$$

Ο υπολογισμός της στιγμιαίας ταχύτητας v_f, εξαρτάται από τις συνθήκες της ροής και τον τύπο της παρακολούθησης σωματιδίου. Σε περίπτωση τυρβώδους ροής, η στιγμιαία ταχύτητα του ρευστού αποτελείται από τη μέση τιμή $\overline{v_f}$ και την αντίστοιχη στιγμιαία διακύμανση $\acute{v}_f$. Η διακύμανση της ταχύτητας $\acute{v}_f$, υποτίθεται ότι επικρατεί στο πεδίο όσο ο χρόνος αλληλεπίδρασης μεταξύ της δίνης και του σωματιδίου είναι μικρότερος του χρόνου ζωής της δίνης, και όσο η μετατόπιση του στο χώρο είναι μικρότερη του χαρακτηριστικού μήκους της δίνης. Αν κάποια από τις δύο παραπάνω συνθήκες πάψει να ισχύει, το σωματίδιο θεωρείται ότι μπαίνει σε μια καινούρια δίνη με νέα χαρακτηριστικά, διακύμανσης της ταχύτητας $\acute{v}_f$, χρόνου ζωής τ_e και χαρακτηριστικού μήκους της δίνης l_e που υπολογίζονται από της τοπικές ιδιότητες της τύρβης:

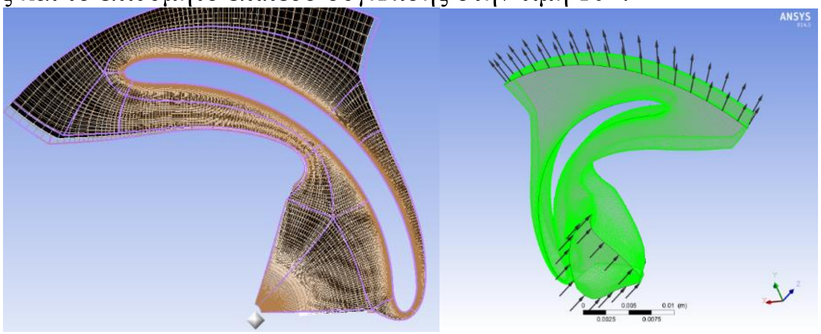
$$\acute{v}_f=\Gamma\left(\frac{2k}{3}\right)^{0,5}\qquad \tau_e=\frac{l_e}{(2k/3)^{0,5}}\qquad l_e=\frac{C_\mu^{3/4}k^{3/2}}{\varepsilon}$$

όπου η μεταβλητή Γ εξαρτάται από τη μεταβλητότητα της τύρβης γύρω από μια μέση τιμή. Λόγω αυτής της τυχαιότητας, κάθε συνιστώσα της διαταραχής της ταχύτητας (u’,v’,w’) έχει διαφορετική ταχύτητα σε διαφορετική δίνη.

ΑΝΑΛΥΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΡΕΥΣΤΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Πτερωτή

Τα αποτελέσματα που προκύτουν από τον κώδικα σε Matlab (Πίνακας 1) εισάγονται στο σχεδιαστικό λογισμικό ANSYS BladeGen που είναι κατάλληλο για τη γεωμετρική σχεδίαση στροβιλομηχανών όπου υπάρχει συμμετρία γύρω από τον άξονα περιστροφής. Εκεί παρέχονται οι βασικές γεωμετρικές διαστάσεις της αντλίας στη μεσημβρινή της τομή καθώς και η μεταβολή της γωνίας του πτερυγίου β και της πολικής γωνίας θέσης της μέσης γραμμής του θ. Για τη βελτιστοποίηση του σχεδιασμού της πτερωτής, μετά την τρισδιάστατη σχεδίαση της πτερωτής, ακολουθεί η δημιουργία του απαιτούμενου υπολογιστικού πλέγματος στο λογισμικό TurboGrid της ANSYS. Στο TurboGrid, το οποίο είναι κατάλληλο για σχεδίαση πλέγματος σε στροβιλομηχανές, δημιουργήθηκε με τον ίδιο τρόπο πλέγμα για όλες τις πτερωτές που σχεδιάστηκαν. Τα πλέγματα που προκύπτουν είναι δομημένα με πολλαπλά blocks (multiblock structured meshes). Αρχικά επιλέγεται η ATM Optimized Topology, η οποία δημιουργεί την τοπολογία επάνω στην οποία βασίζεται η δημιουργία του πλέγματος στην πτερωτή. Το συνολικό μέγεθος του πλέγματος που επιλέχθηκε τελικά είναι περίπου 1,000,000 κόμβοι όπου και επιτυγχάνεται ανεξαρτησία πλέγματος. Κατά τη δημιουργία του πλέγματος επιλέγεται μεγαλύτερη πύκνωση στην περιοχή του οριακού στρώματος. Τελικά γίνεται ο καθορισμός των δεδομένων για την επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων στο λογισμικό επίλυσης των εξισώσεων της ροής ANSYS CFX. Πιο συγκεκριμένα, ορίζεται ανάλυση μόνιμης ροής, εργαζόμενο συνεχές μέσο με τις βασικές ιδιότητες του νερού, μοντέλο τύρβης το k-ε, ορίζεται ο άξονας περιστροφής και η ταχύτητα περιστροφής στα 1750 rpm. Ακόμα ορίζεται στην είσοδο οριακή συνθήκη παροχής μάζας στα 0.083 kg/s ενώ στην έξοδο επιβάλλεται τιμή της στατικής πίεσης ίση με 1.17 bar, ενώ οι στερεές επιφάνειες θεωρούνται ως λεία τοιχώματα μηδενικής ολίσθησης. Τέλος ορίζεται η ένταση της τύρβης στην είσοδο ίση με 5% καθώς και το επιθυμητό επίπεδο σύγκλισης στην τιμή 10^{-9}.

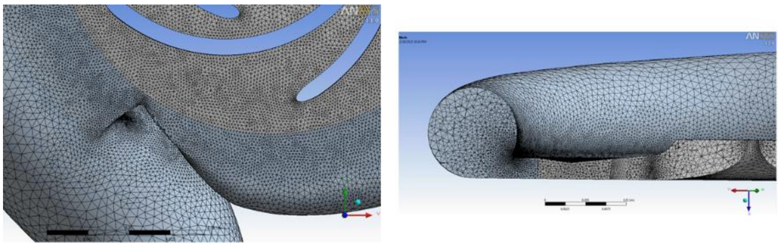


α) β)

Σχήμα 2: α) Δημιουργία τοπολογίας, β) Ορισμός Οριακών Συνθηκών.

Ανάλυση συστήματος Πτερωτής - κελύφους

Το πλέγμα για το σύνολο της αντλίας (κέλυφος και πτερωτή), δημιουργήθηκε με το πρόγραμμα Meshing Tool της ANSYS, δημιουργώντας πλέγματα διαφορετικής πυκνότητας στην πτερωτή και στο κέλυφος. Για την πτερωτή είναι επιθυμητή η δημιουργία πλέγματος με παρόμοια ποιότητα με αυτού που ήδη έχει παρουσιαστεί στην προηγούμενη ενότητα ενώ στο κέλυφος επιτυγχάνεται πλέγμα με υψηλή πύκνωση ιδιαίτερα στις περιοχές της γλώσσας και της διεπιφάνειας των δύο πλεγμάτων, της περιστρεφόμενης πτερωτής και του κελύφους. Τελικά, το μη δομημένο πλέγμα ολόκληρης της διάταξης πτερωτής-κελύφους αποτελείται από 770,000 κόμβους και 4,400,000 κελιά, από τα οποία 655,000 κόμβοι και 3,820,000 κελιά ανήκουν στο κέλυφος ενώ 115,000 κόμβοι και 580,000 κελιά ανήκουν στην πτερωτή. Ο καθορισμός των δεδομένων για την επίλυση από το ANSYS CFX έγινε κάνοντας χρήση των ίδιων οριακών συνθηκών στην είσοδο και στην έξοδο, με αυτών της ανάλυσης της απομονωμένης πτερωτής. Στην προκειμένη περίπτωση η μοναδική διαφορά είναι ότι πρέπει να ξεκαθαριστεί η ύπαρξη δύο διαφορετικών συστημάτων αναφοράς, ενός σταθερού και ενός περιστρεφόμενου.



α) β)

Σχήμα 3: Πλέγμα α) στην πτερωτή β) στο κέλυφος της αντλίας.

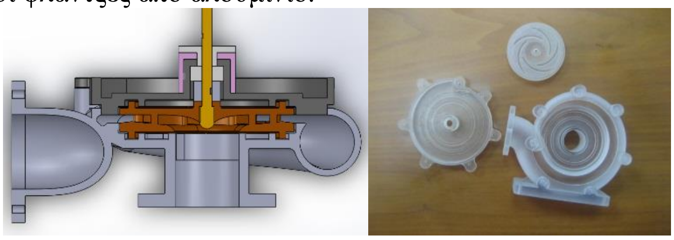
Μελέτη Αιμόλυσης

Για τη μελέτη της αιμόλυσης χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της παρακολούθησης σωματιδίων όπου έγινε χρήση των ίδιων δεδομένων με την παράγραφο 4.2 αλλά σε αυτή προστέθηκαν τα εξής:

- Στο ρευστό που ρέει εντός της μηχανής προστίθενται 500 στερεά σωματίδια με τις ιδιότητες του νερού και με μέση διάμετρο $7 \cdot 10^{-6}$ m.
- Τα σωματίδια εισάγονται με ταχύτητα 0.29 m/s και με παροχή 0.006 kg/s.
- Γίνεται χρήση της μεθόδου One Way Coupling.

ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΙΚΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΚΑΙ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΑ ΑΝΤΛΙΑΣ

Ολοκληρώνοντας την υδροδυναμική βελτιστοποίηση της φυγοκεντρικής αντλίας ακολούθησε η μηχανολογική σχεδίασή της με στόχο την παραγωγή του τρισδιάστατου σχεδίου το οποίο και εκτυπώνεται σε μηχανή τρισδιάστατης εκτύπωσης. Στο σημείο αυτό παρουσιάζονται και όλα τα υπόλοιπα εξαρτήματα της μηχανής τα οποία ως επί το πλείστον κατασκευάστηκαν σε τόρνο. Η σχεδίαση έγινε στο σχεδιαστικό πρόγραμμα SolidWorks και στο Σχήμα 4α παρουσιάζονται αναλυτικά όλα τα μέρη της μηχανής. Την ολοκλήρωση της μηχανολογικής σχεδίασης ακολούθησε η κατασκευή των επιμέρους μερών της αντλίας. Τα στοιχεία της κατασκευής (Σχ. 4β) τυπώθηκαν σε μηχανή τρισδιάστατης εκτύπωσης από φωτοπολυμερικό υλικό (Objet VeroClear FullCure 810) ενώ ο άξονας είναι από χάλυβα και οι φλάντζες από αλουμίνιο.



α) β)

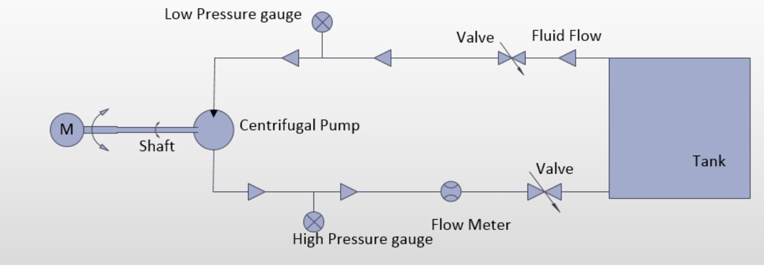
Σχήμα 4: α) Τομή τρισδιάστατου σχεδίου αντλίας. β) Τρισδιάστατη εκτύπωση.

ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ

Για την κατασκευή της πειραματικής διάταξης έγινε χρήση σωληνώσεων από πλαστικό εύκαμπτου τύπου, δύο βαλβίδων για την απομόνωση του κυκλώματος κατά τη διάρκεια της μη χρήσης του, μίας δεξαμενής χωρητικότητας 75 lt, ενός ροόμετρου τύπου Venturi με χρήση δισκοβαλβίδας και ενός πολυεργαλείου Dremel για την περιστροφή της αντλίας, ενώ απαραίτητη ήταν η χρήση των μετρητικών οργάνων μέτρησης πίεσης και μέτρησης στροφών σε κάθε χρονική στιγμή. Το κρισιμότερο σημείο αφορά την εγκατάσταση του ροόμετρου το οποίο θέτει τους εξής δύο περιορισμούς:

- Το μήκος της σωλήνωσης πριν το ροόμετρο πρέπει να είναι ίσο με πέντε φορές τη διάμετρό της
- Το μήκος της σωλήνωσης μετά το ροόμετρο πρέπει να είναι δύο φορές τη διάμετρό της

Στο Σχήμα 5 παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής της διάταξης (Σχ. 5α) και μια φωτογραφία της πλήρους διάταξης συναρμολογημένης (Σχ. 5β).



α) β)

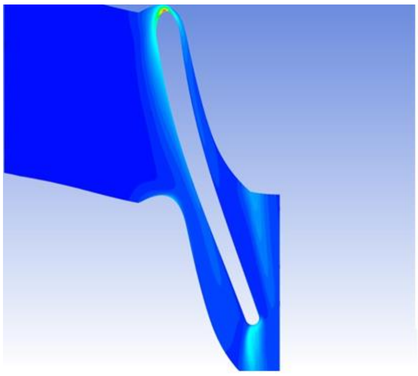
Σχήμα 5: α) Διάγραμμα ροής πειραματικής διάταξης και β) φωτογραφία της πειραματικής διάταξης.

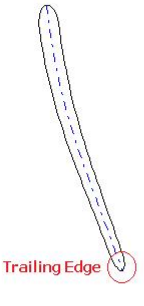
ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Υπολογιστικά Αποτελέσματα

Η ενότητα των υπολογιστικών αποτελεσμάτων αφορά τα αποτελέσματα του υπολογιστικού πακέτου της ANSYS. Αυτά τα αποτελέσματα διακρίνονται μεταξύ αυτών που αφορούν την υδροδυναμική βελτιστοποίηση της αντλίας και τη δημιουργία των χαρακτηριστικών της καμπυλών αλλά και τη μοντελοποίηση της αιμόλυσης.

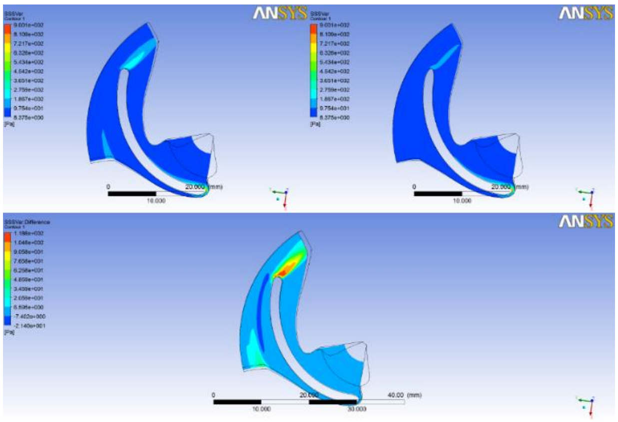
Στην πρώτη φάση της υδροδυναμικής βελτιστοποίησης τα κριτήρια επίτευξης των στόχων αφορούν τρεις παραμέτρους: την επίτευξη μη ανακυκλοφορίας, την επίτευξη αύξησης πίεσης 16 kPa και την επίτευξη χαμηλού βαθμωτού μέτρου διάτμησης. Η πρώτη πτερωτή που δοκιμάστηκε δεν παρουσίασε ανακυκλοφορίες αλλά απέτυχε να προσδώσει την επιθυμητή διαφορά πίεσης. Η αιτία της αποτυχίας αφορά στη μη δυνατότητα του κώδικα της Matlab να περιγράψει την τρισδιάστατη πραγματική ροή του προβλήματος. Επομένως με βάση τις σχέσεις ομοιότητας αυξήθηκε η περιστροφική ταχύτητα της πτερωτής από 1750 rpm σε 2750 rpm. Με την αύξηση της ταχύτητας η αύξηση πίεσης της αντλίας υπερεκτιμήθηκε καθώς υπολογίστηκε στα 19 kPa (αντί για 16 kPa). Στο στάδιο αυτό δοκιμάστηκαν δύο αλλαγές, η μείωση της ταχύτητας περιστροφής στα 2550 rpm και η αλλαγή της γεωμετρίας της ακμής εκροής του πτερυγίου από τύπου «cut off» σε έλλειψη καθώς δημιουργεί μια πολύ οξεία γωνία στην οποία υπάρχει μεγάλη συγκέντρωση τάσεων. Οι συγκεκριμένες αλλαγές όχι μόνο διατήρησαν τα χαμηλά ποσοστά ανακυκλοφορίας αλλά δημιούργησαν και αποδεκτή αύξηση πίεσης. Το μοναδικό πρόβλημα που παρέμεινε αφορά στο υψηλό επίπεδο διάτμησης που εμφανίζονται στις ακμές προσβολής και εκροής του πτερυγίου (Σχ. 6α). Για το λόγο αυτό προτείνεται η αύξηση του λόγου των ακτινών της έλλειψης στο τέλος του πτερυγίου ώστε η επιφάνειά του να μην μεταβάλλεται τόσο απότομα (Σχ. 6β). Αυτό αναμένεται να μειώσει την κλίση της ταχύτητας και κατά συνέπεια το μέτρο της διάτμησης. Τελικά η αλλαγή αυτή επιδρά καταλυτικά στη μείωση της διάτμησης όπως φαίνεται καθαρά από το Σχήμα 7, όπου η μεγαλύτερη μείωση του μεγέθους συναντάται στην περιοχή της ακμής εκροής.





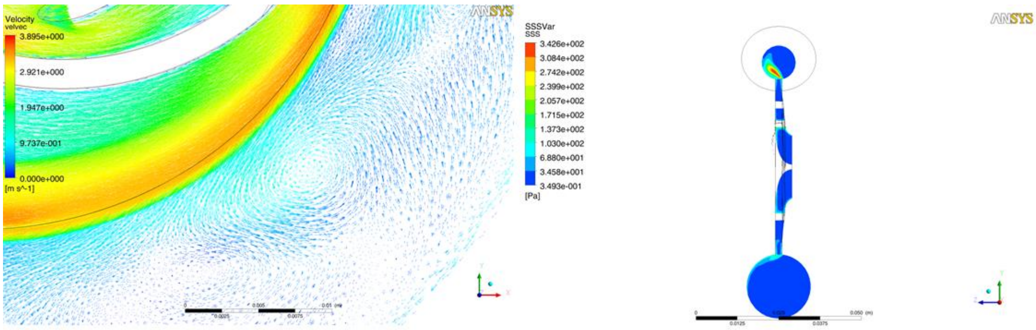
α) β)

Σχήμα 6: α) Χωρική μεταβολή του βαθμωτού μέτρου διάτμησης. β) Αλλαγή λόγου ακτινών έλλειψης.



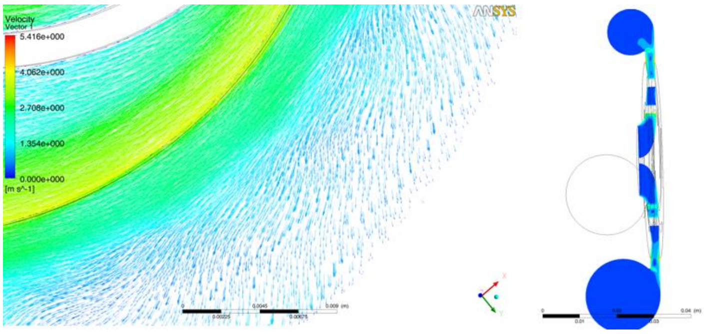
Σχήμα 7: Σύγκριση του βαθμωτού μέτρου διάτμησης μεταξύ δύο διαφορετικών πτερωτών.

Για τη σχεδίαση του κελύφους αρχικά χρησιμοποιήθηκε ένα συμμετρικό κέλυφος (Σχ. 1α) του οποίου όμως η υπολογιστική ανάλυση παρουσιάζει έντονη ανακυκλοφορία της ροής (Σχ. 8α) αλλά και διάτμηση (Σχ. 8β). Ως αποτέλεσμα προτείνεται η αλλαγή του κελύφους σε εφαπτομενικό (Σχ. 1β) με στόχο την παραλαβή αυτών των υψηλών ταχυτήτων στην πλήμνη της πτερωτής αλλά και αύξηση του ύψους πτερωτής στην έξοδο από 2 mm σε 2.5 mm, ώστε να μειωθεί η ταχύτητα και άρα και το επίπεδο διάτμησης. Τελικά τα αποτελέσματα της ανακυκλοφορίας και της διάτμησης (Σχ. 9α,β) είναι σαφώς βελτιωμένα και για το λόγο αυτό η συγκεκριμένη γεωμετρία προτείνεται ως η τελική γεωμετρία της φυγοκεντρικής αντλίας.



α) β)

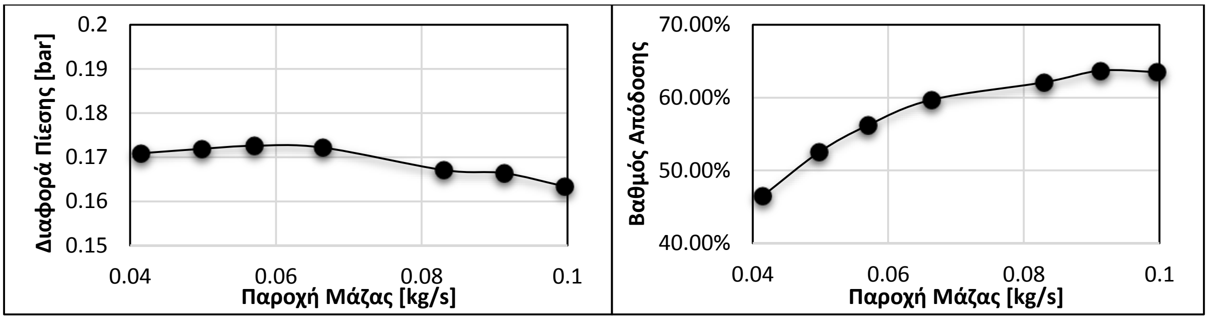
Σχήμα 8: α) Παρουσία ανακυκλοφορίας στο κέλυφος. β) Βαθμωτό μέτρο διάτμησης.



α) β)

Σχήμα 9: α) Κατανομή ταχύτητας. β) Βαθμωτό μέτρο διάτμησης.

Στο Σχήμα 10 παρουσιάζονται οι χαρακτηριστικές της αύξησης πίεσης και του βαθμού απόδοσης που υπολογίστηκαν για την τελική γεωμετρία. Το αποτέλεσμα της μελέτης της αιμόλυσης μέσω της μεθόδου παρακολούθησης σωματιδίων είναι ότι ο μέσος χρόνος παραμονής των σωματιδίων μέσα στη μηχανή είναι 0.115 δευτερόλεπτα και το μέσο βαθμωτό μέτρο διάτμησης για όλα τα σωματίδια είναι 36.52 Pa. Συνεπώς γίνεται εφικτός ο υπολογισμός της καταστροφής της αιμοσφαιρίνης και συνεπώς της αιμόλυσης κάνοντας χρήση των μαθηματικών σχέσεων του της ενότητας 3.1. Τελικά η μέση καταστροφή της αιμοσφαιρίνης βρίσκεται στο 0.0396% γεγονός που κάνει τη μηχανή που σχεδιάστηκε ιδιαιτέρως ικανοποιητική για χρήση από ασθενείς.



α) β)

Σχήμα 10: Χαρακτηριστική καμπύλη α) αύξησης πίεσης, β) βαθμού απόδοσης.

Αυτό βέβαια αφορά μια μέση πρόβλεψη, επομένως μελετώνται και ορισμένα ακραία σενάρια. Αυτά παρατηρούνται είτε κατά τον μέγιστο χρόνο παραμονής των σωματιδίων μέσα στη μηχανή (0.935 s) είτε κατά τη λειτουργία της μηχανής με μέγιστη διάτμηση (348 Pa). Υπολογίζεται λοιπόν ότι στο σενάριο:

- όπου στο αιμοσφαίριο ασκείται η μέγιστη διάτμηση, η καταστροφή της αιμοσφαιρίνης βρίσκεται στο μη αποδεκτό ποσοστό του 9.1%.
- όπου το αιμοσφαίριο ανήκει σε ροϊκή γραμμή η οποία υφίσταται συνεχείς ανακυκλοφορίες η καταστροφή της αιμοσφαιρίνης βρίσκεται στο αποδεκτό ποσοστό του 0.2%.
- όπου στη ροϊκή γραμμή του αιμοσφαιρίου ασκείται και η μέγιστη διάτμηση και ο μέγιστος χρόνος παραμονής η παραγωγή της αιμοσφαιρίνης βρίσκεται στο απαγορευτικά υψηλό ποσοστό του 47.45%

Πειραματικά Αποτελέσματα

Τα αποτελέσματα της πειραματικής μελέτης είναι η αύξηση πίεσης της αντλίας και η διαφορά πίεσης του ροόμετρου ενώ οι στροφές ανά λεπτό του δρομέα ελέγχονταν ώστε να παραμένουν σταθερές στις 2550 rpm. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην Σχήμα 11, αφορούν τον μέσο όρο των δεδομένων από τις τρεις μετρήσεις και συγκρίνονται με τα υπολογιστικά αποτελέσματα του υπολογιστικού πακέτου λογισμικού ANSYS CFX.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

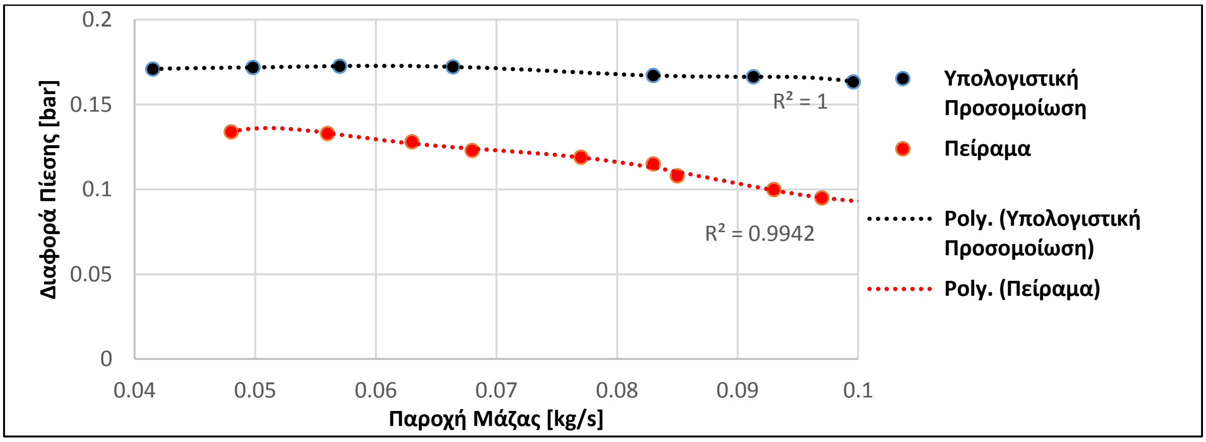
Παρατηρώντας τις δύο χαρακτηριστικές καμπύλες του Σχήματος 11 φαίνεται ότι υπάρχει μια σημαντική διαφορά μεταξύ τους ακόμη και σε κανονικές συνθήκες λειτουργίας, γεγονός που κάνει απαραίτητη την κριτική αξιολόγηση και των υπολογιστικών αλλά κυρίως των πειραματικών μετρήσεων. Οι κύριες αιτίες αυτής της απόκλισης συνοψίζονται παρακάτω:

- Η απουσία ικανοποιητικής βάσης στήριξης για την κινητήρια μονάδα είχε ως αποτέλεσμα μετακινήσεων της τάξης του 0.1 έως 0.5 mm οι οποίες επηρεάζουν σε μεγάλο βαθμό την θέση της πτερωτής ακόμη και το μέγεθός της.
- Από την εκκίνηση του πειράματος παρατηρήθηκαν μικρές διαρροές νερού κυρίως σε δύο σημεία. Μπορεί να ισχυριστεί κανείς ότι διαρροές είναι σχεδόν αναπόφευκτό να υπάρχουν, αλλά επίσης σίγουρα επηρεάζουν την αύξησης πίεσης.
- Ανακυκλοφορία εργαζόμενου μέσου προς την είσοδο, λόγω αδυναμίας των καναλιών ανακυκλοφορίας να ανακόψουν τη ροή.
- Παρόλο που το εργαζόμενο μέσο φιλτραρίστηκε παρατηρήθηκαν μικρές ακαθαρσίες οι οποίες σε μια μηχανή πολύ μικρού μεγέθους επηρεάζουν τη ροή.

Τελικά ως περαιτέρω εργασία προτείνεται:

- η μελέτη και μοντελοποίηση του δυναμικού συστήματος
- η βελτιστοποίηση της πειραματικής διάταξης για ακριβέστερα αποτελέσματα

- η πειραματική μελέτη της διάτμησης εντός της μηχανής μέσω οπτικοποίησης της ροής με χρήση οπτικής μεθόδου.
- η μελέτη των χαρακτηριστικών λειτουργίας της μηχανής με αλλαγή των γωνιών των πτερυγίων
- η αντικατάσταση του νερού με εργαζόμενο μέσο με ιδιότητες όμοιες με αυτές του αίματος θα δώσουν εξίσου ενδιαφέροντα συμπεράσματα.
- η δοκιμή σχεδίασης μικρότερης πτερωτής και κελύφους ώστε να είναι πιο κοντά στις σχεδιαστικές απαιτήσεις του συγκεκριμένου προϊόντος
- η μελέτη για την εύρεση του κατάλληλου υλικού για αποφυγή της καταστροφής του αίματος
- η σχεδίαση συστήματος αυτομάτου ελέγχου το οποίο να ρυθμίζει τη λειτουργία της αντλίας ανάλογα με τις απαιτήσεις της καρδιάς.



Σχήμα 11: Σύγκριση χαρακτηριστικών καμπυλών αύξησης πίεσης της υπολογιστικής προσομοίωσης και της πειραματικής διάταξης.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Anderson, John D. 1995. Computational Fluid Dynamics - The Basic with Application.

Bludszuweit, C. 1995. "Three-dimensional numerical prediction of stress loading of blood particles in a centrifugal pump." Artificial Organs, 19(7): 590-596.

Bludszuweit., C. 1995. "Model for a general mechanical blood damage prediction." Artificial Organs, 19(7): 583-589.

Shaun, G. D., Timms, D., Gaddum, N., Mason D. G. and Fraser, J. F. 2011. Biventricular Assist Devices: A Technical Review. Annals of Biomedical Engineering, 39(9).

Gülich, J. F. 2008. Centrifugal Pumps. Berlin: Springer.

Wurzinger, L. J., Opitz, R. and Eckstein, H. 1986. "Mechanical bloodtrauma. An overview." Angeiologie, 38(3): 81-97.

Lobanoff, Val S. and Ross, R. R.. 1992. Centrifugal Pumps: Design and Application, 2nd Edition. Elsevier Science & Technology.

Behbahani, M., Behr, M., Hormes, M., Steinseifer, U., Arora, D., Coronado, O. and Pasquali, M. 2009. "A Review of Computational Fluid Dynamics Analysis of Blood Pumps." European Journal of Applied Mathematics 20: 363-397.

Giersiepen, M., Wurzinger, L.J., Opitz, R. and Reul, H. 1990. "Estimation of shear stress-related blood damage in heart valve prostheses-in vitro comparison of 25 aortic valves." International Journal of Artificial Organs 13(5): 300-306.

Γούλας, Α. Κ. Βασικές Αρχές Στροβιλομηχανών. Εκδόσεις Γιαχούδη.

DESIGN, COMPUTATIONAL ANALYSIS AND EXPERIMENTAL ASSESSMENT OF A VENTRICULAR ASSIST DEVICE

G. Mousmoulis, N. Peitzikas, K. Vafiadis, A. Tourlidakis
Mechanical Engineering Department
School of Engineering, University of Western Macedonia
Mpakola & Sialvera, 50100, Kozani
Email: atourlidakis@uowm.gr

ABSTRACT

During the last decades there is a significant growth in the number of cardiac failure cases, especially in countries of the developed world. The only permanent treatment is heart transplantation. Recently, a new method for the treatment of this phenomenon, that uses ventricular assist devices (VAD) has been proposed. The purpose of this paper is to present the design process, the computational analysis and the experimental assessment of a centrifugal pump that can be utilized in order to assist the left ventricle of the heart. More specifically, by applying the basic dimensional design principles of turbomachinery, a Matlab code was developed for the preliminary design of the geometry of the impeller. Subsequently, the impeller was optimised at four stages with the aim to reduce or even avoid flow recirculations, high vorticity levels and strong velocity gradients (scalar shear modulus) of the flow which are related to the destruction of blood cells. In addition, the volute of the centrifugal pump was designed according to the same criteria. Ultimately a study of hemolysis which is relates to the destruction of red blood cells as a function of the flow shear forces that are exerted during their passage through the pump was carried out. For the purposes of the experimental tests the pump was designed and constructed using 3D printing technology and an experimental rig was developed for this purpose. Detailed results of the computational fluid dynamics simulations are presented and discussed. A comparison of the predicted pressure rise characteristic against the experimental testing results is carried out and the results are assessed.

ΑΝΑΛΥΣΗ ΡΟΗΣ ΣΕ ΑΡΤΗΡΙΑΚΟ ΤΟΙΧΩΜΑ ΜΕ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΑΘΗΡΟΣΚΛΗΡΩΤΙΚΟΥ ΥΛΙΚΟΥ

Δημήτριος Γ. Μπαϊρακτάρης[1], Ιωάννης Β. Σούλης[1], Γεώργιος Δ. Γιαννόγλου[2]

[1]Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Δημοκρίτειου Πανεπιστημίου Θράκης, Ξάνθη, Ελλάδα

[2]ΑΧΕΠΑ Πανεπιστημιακό Γενικό Νοσοκομείο, 1η Καρδιολογική Κλινική, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

Δημήτριος Γ. Μπαϊρακτάρης dmpaira@gmail.com
Ιωάννης Β. Σούλης soulis@civil.duth.gr
Γεώργιος Δ. Γιαννόγλου yan@med.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ
Η παρούσα εργασία στοχεύει στον υπολογισμό της κατανομής της συγκέντρωσης LDL (Low Density Lipoprotein) (χαμηλής πυκνότητας λιποπρωτεΐνης) σε μη-φυσιολογικά αρτηριακά τοιχώματα. Η LDL είναι υπεύθυνη για την αθηροσκλήρωση. Πολυάριθμες δισδιάστατες εικόνες από τομές αξονικής τομογραφίας, 2D CT scans, ενός ασθενούς χρησιμοποιήθηκαν για την ανακατασκευή της γεωμετρίας μιας ανθρώπινης θωρακικής αορτής (αυλός και τοίχωμα) με τη χρήση κατάλληλων λογισμικών προγραμμάτων. Πιο συγκεκριμένα το τοίχωμα, μετά τη σύνθεση της γεωμετρίας, είχε μεταβλητό πάχος και στο εσωτερικό του θεωρήθηκε η παρουσία αθηροσκληρωτικού υλικού. Έτσι, κατασκευάστηκαν τυχαία 4 όγκοι και θεωρήθηκαν ως αδιαπέραστες «προβληματικές» περιοχές αντιπροσωπεύοντας το ασβέστιο, το νεκρωτικό πυρήνα, το ινώδες και το παχύ-ινώδες. Η διατοιχωματική πίεση επιλέχτηκε να είναι α) 70.0 (mm.Hg) και β) 120.0 (mm Hg). Η ροή θεωρήθηκε σταθερή και το αρτηριακό τοίχωμα ελήφθη ως ένα στρώμα (layer) ομογενές στο οποίο παρεμβάλλονται οι προβληματικές αυτές περιοχές. Οι τιμές διάχυσης και διαπερατότητας ελήφθησαν σταθερές ενώ η τιμή της ταχύτητας διηθήσεως ελήφθη ως συνάρτηση της τοιχωματικής διατμητικής τάσης. Οι εξισώσεις Navier-Stokes και ο νόμος Darcy χρησιμοποιήθηκαν στο εσωτερικό της αρτηρίας και στο αρτηριακό τοίχωμα αντίστοιχα. Η επίλυση έγινε αριθμητικά (Gambit, Fluent codes). Στα αποτελέσματα παρατηρήθηκε τοπική συσσώρευση της συγκεντρώσεως της LDL, γύρω από τις «προβληματικές» περιοχές. Με την αύξηση της διατοιχωματικής πίεσης η συγκέντρωση της LDL αυξάνει σημαντικά.

Λέξεις Κλειδιά: Θωρακική αορτή, LDL, διατοιχωματική πίεση, αρτηριακό τοίχωμα

1.ΕΙΣΑΓΩΓΗ
Η επιστήμη της Υπολογιστικής Μηχανικής των Ρευστών έχει γίνει δημοφιλής τα τελευταία χρόνια, γεγονός που πιστοποιούν και τα πολυάριθμα επιστημονικά συνέδρια αλλά και οι δημοσιεύσεις σε έγκριτα επιστημονικά περιοδικά ανά τον κόσμο. Μία αναζήτηση στο Google Scholar με την ονομασία CFD (Computational Fluid Dynamics) έδειξε πληθώρα αναφορών στο συγκεκριμένο αντικείμενο. Αυτό επιβεβαιώνει γιατί πολυάριθμοι επιστημονικοί τομείς, κυρίως της Μηχανολογίας, της Αεροναυπηγικής, της επιστήμης των Πολιτικών Μηχανικών και της Εμβιομηχανικής, έχουν ως βασικό εργαλείο τη μαθηματική προσομοίωση.

Η ανάλυση ροής σε αρτηρίες συναντάται κυρίως από το 1995 και μετά. Η αρχή έγινε με την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων μέσα στον αυλό της αρτηρίας υπολογίζοντας την κατανομή της LDL στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου του αυλού, Rappitsch (1996). Έτσι για πρώτη φορά συνδέεται η τοιχωματική διατμητική τάση με τη συσσώρευση της LDL και τη δημιουργία αθηρωματικής πλάκας, Wada κ.ά. (2000), Wada κ.ά. (2002) και συγκεκριμένα σε περιοχές με χαμηλή τοιχωματική διατμητική τάση παρατηρείται πόλωση συγκέντρωσης της LDL. Οι Karner κ.ά. (2000) και Karner κ.ά. (2001) ανέπτυξαν ένα μοντέλο, το πιο πολύπλοκο ως τώρα αλλά και το πιο ρεαλιστικό, με τέσσερα στρώματα για τον υπολογισμό της μεταφοράς των μακρομορίων σε αρτηρία χωρίς καμπύλες. Ωστόσο αυτό το μοντέλο για να επιλυθεί έπρεπε να οριστεί ένας μεγάλος αριθμός παραμέτρων ώστε να καθοριστούν οι φυσικές ιδιότητες του κάθε στρώματος. Για τον υπολογισμό αυτών των φυσικών παραμέτρων που χαρακτηρίζουν το αρτηριακό τοίχωμα χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της ηλεκτρικής αναλογίας, Prosi κ.ά. (2005). Μεθοδικότερη ανάλυση μέσα στο αρτηριακό τοίχωμα, λαμβάνοντας το ως πολυστρωματικό, πραγματοποιήθηκε από τους Yang κ.ά. (2005), οι οποίοι εξέτασαν την επίδραση της διατοιχωματικής πίεσης στην κατανομή της συγκεντρώσεως της LDL σε κάθε στρώμα. Οι Sun κ.ά. (2006) μελέτησαν μία γεωμετρία με αξονο-συμμετρική στένωση και υπολόγισαν την κατανομή της LDL μέσα στο τοίχωμα λαμβάνοντας υπόψιν ότι η υδραυλική αγωγιμότητα είναι συνάρτηση της τοιχωματικής διατμητικής τάσης. Λίγο αργότερα οι Sun κ.ά. (2007) μελέτησαν την επιρροή της παλμικής ροής στη συγκέντρωση της LDL μέσα στο αρτηριακό τοίχωμα χρησιμοποιώντας δύο μοντέλα. Το πρώτο μοντέλο υπολόγιζε τη στιγμιαία υδραυλική αγωγιμότητα ως συνάρτηση της τοιχωματικής διατμητικής τάσης και το αποτέλεσμα ήταν σε κάθε χρονική στιγμή να αντιστοιχεί και διαφορετική ταχύτητα διηθήσεως ενώ το δεύτερο μοντέλο υπολόγιζε τη μέση τιμή της υδραυλικής αγωγιμότητας επιλύοντας τις εξισώσεις στον αυλό για πέντε περιόδους χρησιμοποιώντας παλμική ροή και στη συνέχεια λάμβανε τις τιμές αυτές σε κάθε υπολογιστικό κόμβο για να υπολογίσει την ταχύτητα διηθήσεως σε σταθερή κατάσταση αυτή τη φορά, μειώνοντας έτσι αισθητά τους υπολογισμούς. Οι Olgac κ.ά. (2008) υπολόγισαν την κατανομή της LDL μέσα στο τοίχωμα λαμβάνοντας υπ΄ όψιν το ενδοθήλιο ως όριο ανάμεσα στον αυλό και στο τοίχωμα με ενδοθηλιακά κύτταρα που ανάμεσά τους υπάρχουν σχισμές και ασθενείς ενώσεις καθώς και κανονικές ενδοθηλιακές ενώσεις (μοντέλο τριών πόρων) ενώ για τον υπολογισμό της ταχύτητας διηθήσεως χρησιμοποιήθηκε η ηλεκτρική αναλογία. Όλες οι παραπάνω μελέτες θεωρούσαν το τοίχωμα ως άκαμπτο. Μόλις πρόσφατα οι Chung κ.ά. (2012) υπολόγισαν την κατανομή της LDL μέσα στο αρτηριακό πολυστρωματικό τοίχωμα λαμβάνοντάς το ως ελαστικό. Επιπλέον, οι Samady κ.ά. (2011) απέδειξαν ότι παρά την υψηλή δόση στατίνης για θεραπεία σε ασθενείς με στεφανιαία νόσο, τμήματα της στεφανιαίας αρτηρίας με χαμηλή τοιχωματική διατμητική τάση ανέπτυξαν μεγαλύτερη αθηρωματική πλάκα μέσα σε ένα σύντομο χρονικό διάστημα (6 μήνες) σε σύγκριση με τμήματα περιοχών με μέση και υψηλή τοιχωματική διατμητική τάση. Επομένως, η ανάπτυξη της αθηρωματικής πλάκας σε περιοχές με χαμηλή τιμή τοιχωματικής διατμητικής τάσης ήταν, κατά κύριο λόγο, λόγω της μεγαλύτερης ανάπτυξης του νεκρωτικού πυρήνα και του ινώδους.

Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται η υπολογιστική ανάλυση της ροής εντός των αγγείων θωρακικής αορτής και των τοιχωμάτων αυτών σε μη-φυσιολογική κατανομή του αθηροσκληρωτικού υλικού (ασβέστιο, νεκρωτικός πυρήνας, ινώδες και παχύ-ινώδες). Πραγματοποιείται λοιπόν μια πρώτη προσπάθεια κατανόησης της επίδρασης των προβληματικών αυτών περιοχών στην ποσοτική κατανομή της LDL μέσα στο αρτηριακό τοίχωμα. Υπάρχουν δύο ενότητες εκ των οποίων στην πρώτη πραγματοποιείται ανάλυση της ροής εντός των αγγείων και των τοιχωμάτων αυτών με ταχύτητα διηθήσεως εξαρτώμενη από την τοιχωματική διατμητική τάση για τοιχωματική διαφορά πίεσης 70.0 (mm Hg), ενώ στη δεύτερη πραγματοποιείται αντίστοιχη ανάλυση για τοιχωματική διαφορά πίεσης 120.0 (mm Hg) αντίστοιχα.

2. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

2.1 Εξισώσεις ροής

Οι εξισώσεις ροής (Navier-Stokes), συνέχειας και μεταφοράς μάζας (μεταφοράς-διάχυσης) εντός του αυλού των αγγείων που λαμβάνουν μέρος στην επίλυση των προβλημάτων που εξετάζονται στην παρούσα εργασία είναι (με τη σειρά),

$$\rho\left(u_x\frac{\vartheta u_x}{\partial x}+u_y\frac{\vartheta u_x}{\partial y}+u_z\frac{\vartheta u_x}{\partial z}\right)=-\frac{\vartheta P}{\vartheta_x}+\ \mu\left(\frac{\vartheta^2 u_x}{\vartheta x^2}+\frac{\vartheta^2 u_x}{\vartheta y^2}+\frac{\vartheta^2 u_x}{\vartheta z^2}\right)$$
$$\rho\left(u_x\frac{\vartheta u_y}{\vartheta x}+u_y\frac{\vartheta u_y}{\vartheta y}+u_z\frac{\vartheta u_y}{\vartheta z}\right)=-\frac{\vartheta P}{\vartheta y}+\mu\left(\frac{\vartheta^2 u_y}{\vartheta x^2}+\frac{\vartheta^2 u_y}{\vartheta y^2}+\frac{\vartheta^2 u_y}{\vartheta z^2}\right)$$

$$\rho\left(u_x\frac{\vartheta u_z}{\vartheta x}+u_y\frac{\vartheta u_z}{\vartheta y}+u_z\frac{\vartheta u_z}{\vartheta z}\right)=-\frac{\vartheta P}{\vartheta z}+\mu\left(\frac{\vartheta^2 u_z}{\vartheta x^2}+\frac{\vartheta^2 u_z}{\vartheta y^2}+\frac{\vartheta^2 u_z}{\vartheta z^2}\right)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}=0$$

$$\frac{\vartheta u_x C}{\vartheta x}+\frac{\vartheta u_y C}{\vartheta y}+\frac{\vartheta u_z C}{\vartheta z}=D\left(\frac{\vartheta^2 C}{\vartheta x^2}+\frac{\vartheta^2 C}{\vartheta y^2}+\frac{\vartheta^2 C}{\vartheta z^2}\right)$$

με u_x, u_y, u_z (m/s) σημειώνονται οι συνιστώσες των ταχυτήτων, c (gr/l) η συγκέντρωση, P (Pa) η στατική πίεση, $\mu = ke^{\frac{T_o}{T}}\gamma^{n-1}$ το μοριακό ιξώδες (Pas) όπου T_o είναι η θερμοκρασία αναφοράς και λαμβάνει την τιμή 310.0^o (K), T (K) η τοπική θερμοκρασία, k ο συντελεστής συνοχής (Consistency Index) που λαμβάνει την τιμή 0.00622084 kgs^{n-2}/m, n (Power-Law Index) ο συντελεστής που λαμβάνει την τιμή 0.7, D ο συντελεστής διαχύσεως με τιμή 15.0×10^{-8} (cm^2/s) και $\gamma = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}$ (1/s).

Οι εξισώσεις ροής (νόμος Darcy), συνέχειας και μεταφοράς μάζας (μεταφοράς- διάχυσης- αντίδρασης) εντός του τοιχώματος των αγγείων που λαμβάνουν μέρος είναι (με τη σειρά),

$$u_w=\frac{k_p}{\mu_p}\left(\frac{\vartheta p_w}{\vartheta x}\cdot\hat{\imath}+\frac{\vartheta p_w}{\vartheta y}\cdot\hat{\jmath}+\frac{\vartheta p_w}{\vartheta z}\cdot\hat{k}\right)$$

$$\frac{\vartheta u_x}{\vartheta x}+\frac{\vartheta u_y}{\vartheta y}+\frac{\vartheta u_z}{\vartheta z}=0$$

$$K_{lag}u_w\left(\frac{\vartheta c}{\vartheta x}\cdot\hat{\imath}+\frac{\vartheta c}{\vartheta y}\cdot\hat{\jmath}+\frac{\vartheta c}{\vartheta z}\cdot\hat{k}\right)-D_w\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right)+r_w c_w=0$$

όπου ο συντελεστής ειδικής διαπερατότητας k_p λαμβάνει την τιμή 1.0x10^{-18} (m^2), Sun κ.ά. (2006), το μοριακό ιξώδες μ_p του αίματος λαμβάνει την τιμή 0.001 (Pas), Olgac κ.ά. (2008), ο συντελεστής K_{lag} (συντελεστής υστέρησης της LDL) λαμβάνει την τιμή 0.1486 για πίεση 70.0 (mm Hg) και 1.05 για πίεση 120.0 (mm Hg) αντίστοιχα, Sun κ.ά. (2006), ο συντελεστής D_w που δείχνει την ικανότητα διάχυσης της LDL μέσα στο τοίχωμα λαμβάνει την τιμή 8.0x10^{-13} (m^2/s), Olgac κ.ά. (2008) και ο συντελεστής r_w (σταθερός ρυθμός κατανάλωσης) λαμβάνει την τιμή μηδέν.

2.2 Οριακές συνθήκες

Για την επίλυση της εξίσωσης σταθερής ροής μέσα στον αυλό η ταχύτητα στην είσοδο έλαβε την τιμή 0.05 (m/s) ενώ για την επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς-διάχυσης, πάλι στον αυλό, η συγκέντρωση της LDL στην είσοδο C_o έλαβε την τιμή 1.3 (gr/l). Στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου εφαρμόστηκε η εξίσωση:

$$C_w V_w - D\frac{\partial C}{\partial n}=KC_w$$

όπου K (m/s) ο συντελεστής μεταφοράς μάζας ή διαπερατότητα τοιχώματος, C_w (gr/l) η συγκέντρωση στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου του αυλού και V_w (m/s) (=Jv) η ταχύτητα διηθήσεως. Για τοιχωματική διαφορά πιέσεως 70.0 (mm Hg), η τιμή της διαπερατότητας K ισούται με $2.0x10^{-10}$ (m/s), Bratzler κ.ά. (1977), Truskey κ.ά. (1992), Wada κ.ά. (2002), ενώ για τοιχωματική διαφορά πιέσεως 120.0 (mm Hg) η τιμή K ισούται με 4.84x10^{-9}(m/s), Sun κ.ά. (2007).

Η ταχύτητα διήθησης J_v και η ποσότητα J_s που είναι η ροή της LDL από τον αυλό στο τοίχωμα, υπολογίζεται από τις παρακάτω εξισώσεις των Kedem-Katchalsky, Sun κ.ά. (2006),

$$J_v=L_{p,end}\,(\Delta_{p,end} - \sigma_d\,\Delta\pi)$$

$$J_s = K\,(Cw) + J_v\left(1 - \sigma_f\right) Cw$$

όπου $L_{p,end}$ (mm^2 s/gr) είναι η υδραυλική αγωγιμότητα του ενδοθηλίου, $\Delta_{P,end}$ (mm Hg) είναι η πτώση πίεσης εγκάρσια του ενδοθηλίου και λαμβάνει τιμή ίση με 18.0 (mm Hg) για τοιχωματική διαφορά πιέσεως 70.0 (mm Hg), Olgac κ.ά. (2008) και 40.0 (mm Hg) για τοιχωματική διαφορά πιέσεως 120.0 (mm Hg) αντίστοιχα, σ_d είναι ο συντελεστής ώσμωσης, σ_f είναι ο συντελεστής διάλυσης και λαμβάνει την τιμή 0.997, Yang κ.ά. (2005) και Δ_π είναι η διαφορά της ωσμωτικής πιέσεως εγκάρσια του ενδοθηλίου. Επειδή η ωσμωτική διαφορά πιέσεως επιλέχθηκε να αποσυνδέει τη δυναμική των ρευστών από εκείνη της διαλυμένης ουσίας LDL, η παραπάνω εξίσωση γράφεται,

$$J_v\,(\tau_w)=L_{p,end}\,\Delta_{p,end}$$

Βασιζόμενοι σε δημοσιευμένα πειραματικά δεδομένα, Sun κ.ά. (2006), η εξίσωση μεταξύ της υδραυλικής αγωγιμότητας L_p και της τοιχωματικής διατμητικής τάσης τ_w (Pa) δίνεται,

$$L_p(\tau_w) = [0.392x10^{-12}In(\tau_w + 0.015) + 2.7931x10^{-12}]$$

Επομένως, η ταχύτητα διήθησης ως συνάρτηση της τοιχωματικής διατμητικής τάσης γράφεται,

$$J_v(\tau_w) = [0.392x10^{-12}In(\tau_w + 0.015) + 2.7931\;x\;10^{-12}]\Delta p_{\mathrm{end}}\;\;(m/s)$$

Για τοιχωματική διαφορά πιέσεως 70.0 (mm Hg) και τοιχωματική διαφορά πιέσεως 120.0 (mm Hg) αντίστοιχα, η παραπάνω εξίσωση γράφεται αντίστοιχα,

$$J_v(\tau_w) = [0.392x10^{-12}In(\tau_w + 0.015) + 2.7931x\;10^{-12}]x2399.80\;(m/s)$$

$$J_v(\tau_w) = [0.392\;x10^{-12}In(\tau_w + 0.015) + 2.7931x10^{-12}]x5332.89\;(m/s)$$

Η συγκέντρωση της LDL στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου, από την πλευρά του τοιχώματος, μπορεί να υπολογιστεί αν διαιρεθούν οι ποσότητες J_s με τις αντίστοιχες τιμές της ταχύτητας διήθησης J_v σε κάθε υπολογιστικό κόμβο στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου,

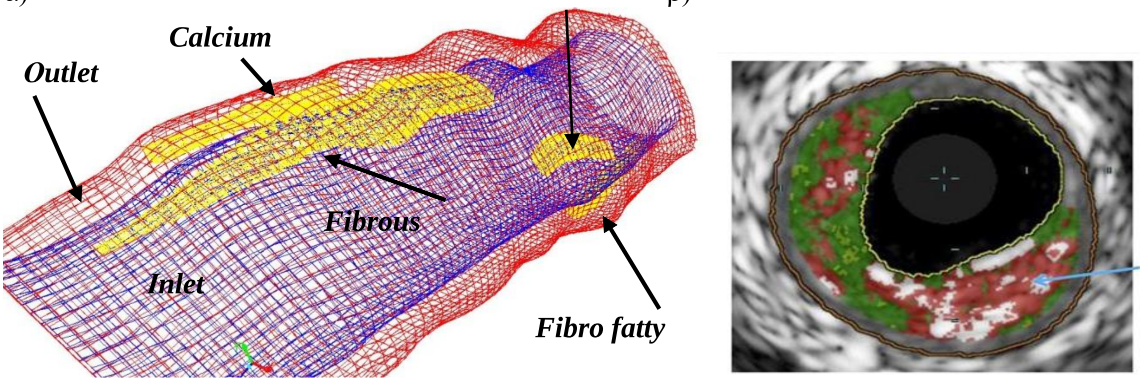
$$c_w = \frac{J_s}{J_v}$$

2.3 Μη-φυσιολογική κατανομή αθηροσκληρωτικού υλικού

Η κατασκευή του μεταβλητού πάχους τοιχώματος επετεύχθη κάνοντας χρήση του λογισμικού Mimics 10.0 μέσω μεγέθυνσης και εν συνέχεια του Rhinoceros 4.0 στο οποίο πραγματοποιήθηκε η ανακατασκευή των διεπιφανειών του αυλού και του τοιχώματος καθώς και του όγκου του τοιχώματος. Το τοίχωμα ελήφθη ως ένα ανομοιογενές υλικό που αποτελείται από περιοχές με μη φυσιολογική κατανομή αθηροσκληρωτικού υλικού όπως, ασβέστιο (Calcium), νεκρωτικό πυρήνα (Necrotic Core), ινώδες (Fibrous) και παχύ-ινώδες (Fibro Fatty) όπως δείχνεται στο Σχήμα 1α. Η εύρεση της κατανομής αυτής δύναται να πραγματοποιείται μέσω επιλογής χαρακτηριστικών υφής της εικόνας τα οποία εισάγονται σε ταξινομητή και αυτός δίνει την εικόνα ταξινομημένη όπως φαίνεται στο Σχήμα 1β. Έτσι, με άσπρο χρώμα δηλώνεται το ασβέστιο, με κόκκινο χρώμα είναι ο νεκρωτικός πυρήνας, με πράσινο σκούρο χρώμα είναι το ινώδες και με πράσινο ανοιχτό χρώμα είναι το παχύ-ινώδες.

Η ανακατασκευή των «προβληματικών» περιοχών λοιπόν επετεύχθη με τα ανωτέρω λογισμικά πακέτα ενώ η κατασκευή του υπολογιστικού δικτύου που πραγματοποιήθηκε με εξάεδρα έγινε με το λογισμικό Gambit 2.4.6 με αποτέλεσμα την κατασκευή τεσσάρων τυχαίων όγκων μέσα στο τοίχωμα μιας θωρακικής αορτής. Η υπολογιστική ανάλυση στο τοίχωμα πραγματοποιήθηκε λαμβάνοντας υπόψη τις περιοχές αυτές με μηδενικό πορώδες, δηλ. ως αδιαπέραστες περιοχές με τη χρήση του λογισμικού Ansys Fluent 14.0. Για την επίλυση των εξισώσεων ροής και μεταφοράς μάζας μέσα στο τοίχωμα χρησιμοποιήθηκε ως είσοδος η διεπιφάνεια του ενδοθηλίου, μπλε χρώμα, και ως έξοδος η διεπιφάνεια του Media-Adventitia δηλ. η περιοχή με κόκκινο χρώμα, Σχήμα 1α.

α) β)

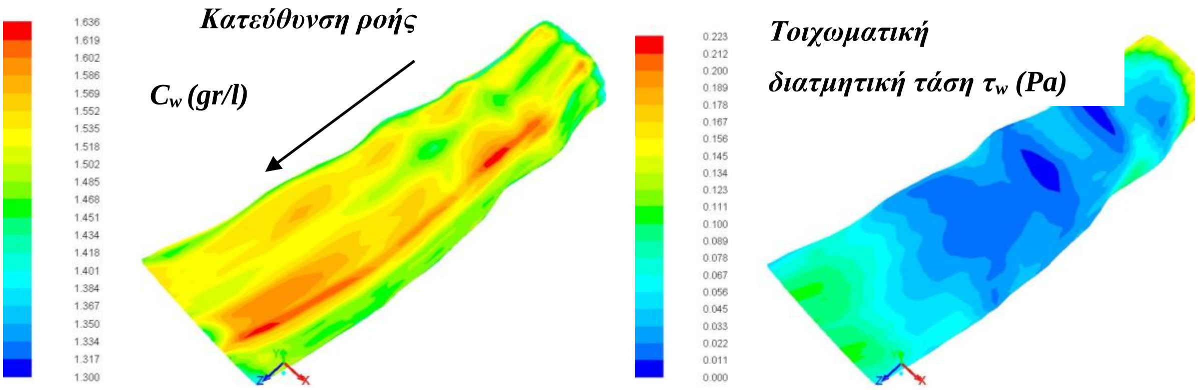


Σχήμα 1 α) Η είσοδος (Inlet) και η έξοδος (Outlet) του αγγείου-τοιχώματος, β) μη-φυσιολογική κατανομή του αθηροσκληρωτικού υλικού με χρωματική απόχρωση.

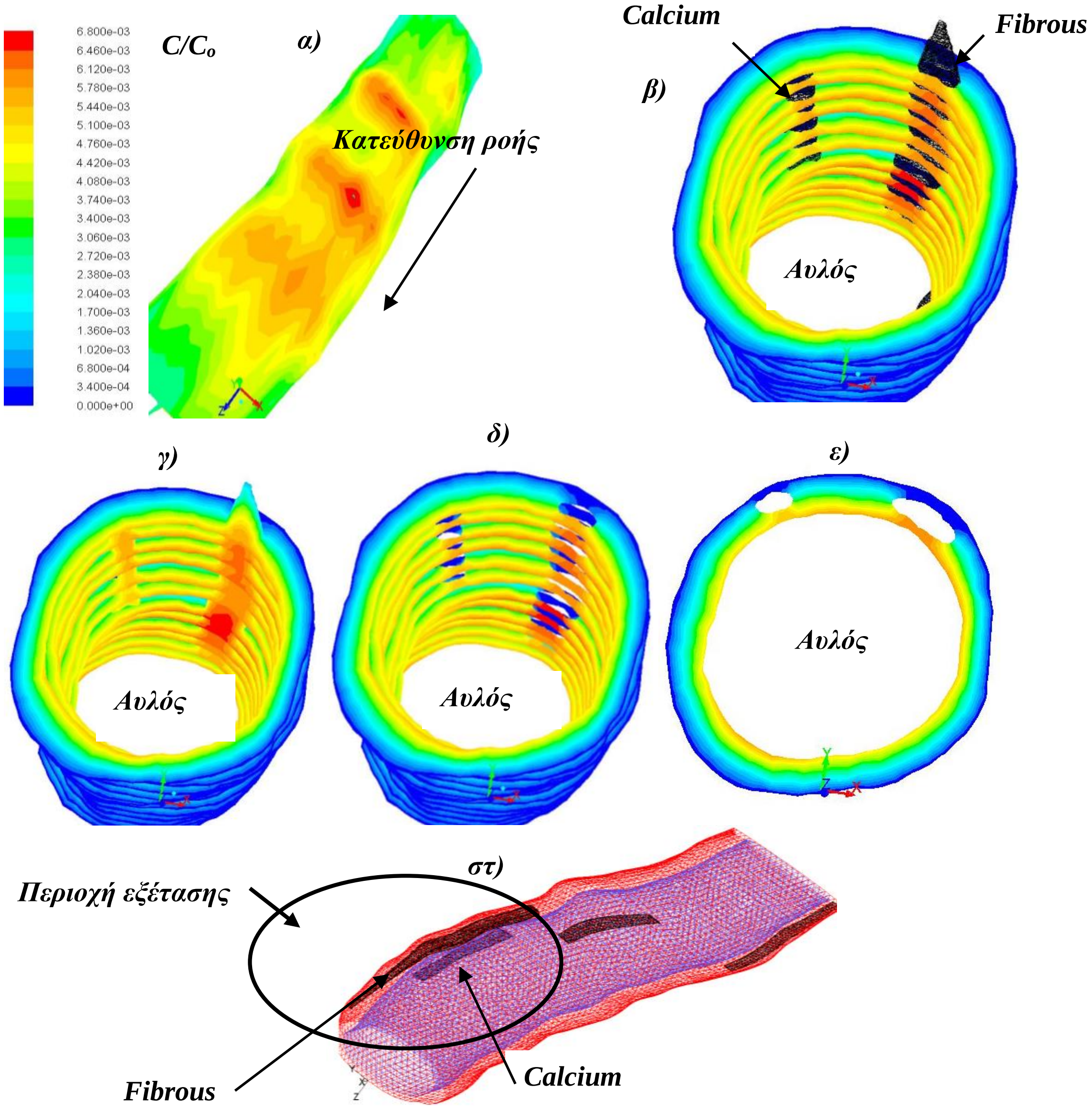
3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ-ΣΥΖΗΤΗΣΗ

3.1Αποτελέσματα με τοιχωματική διαφορά πιέσεως 70.0 (mm Hg)

Στο Σχήμα 2α δείχνεται η κατανομή της συγκεντρώσεως C_w (gr/l) στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου θωρακικής αορτής από την πλευρά του αυλού. Στο Σχήμα 2β δείχνεται η κατανομή της τοιχωματικής διατμητικής τάσης τ_w (Pa) στο ενδοθήλιο. Ενώ στο Σχήμα 3 δείχνεται η κατανομή της συγκεντρώσεως LDL (C/C_o) πλησίον του ενδοθηλίου αλλά από την πλευρά του τοιχώματος που συνίσταται από ανομοιογενές υλικό με ύπαρξη αθηροσκληρωτικού υλικού. Η ροή λαμβάνεται ως σταθερή, η ταχύτητα διηθήσεως εξαρτάται από την τοιχωματική διατμητική τάση και η τοιχωματική διαφορά πίεσης λαμβάνεται 70.0 (mm Hg). Το μείζον πρόβλημα ευρίσκεται στην επίδραση των περιοχών, με μη-φυσιολογική κατανομή αθηροσκληρωτικού υλικού, στην κατανομή της συγκεντρώσεως της LDL μέσα στο τοίχωμα.

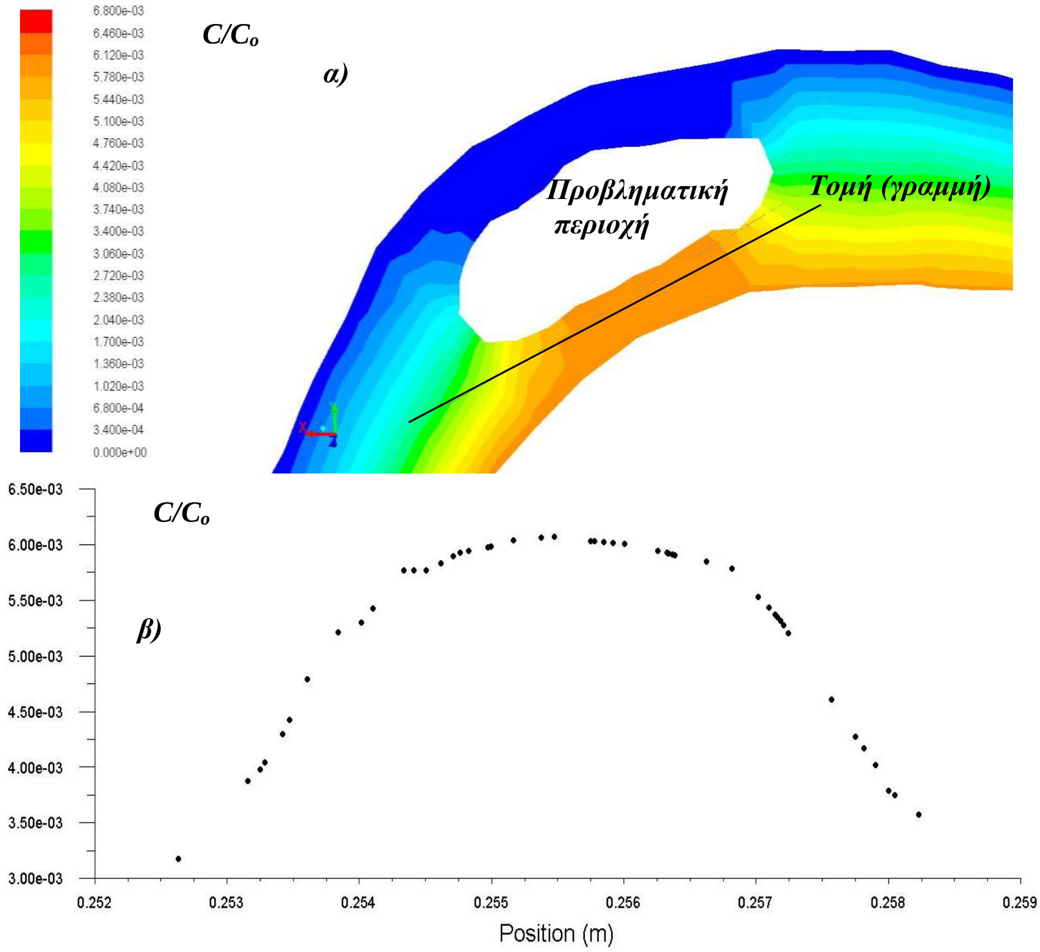


Σχήμα 2.α) Συγκέντρωση C_w (gr/l) της LDL στο ενδοθήλιο του αυλού θωρακικής αορτής για τοιχωματική διαφορά πίεσης 70.0 (mm Hg), β) Τοιχωματική διατμητική τάση (Pa) θωρακικής αορτής για τοιχωματική διαφορά πίεσης 70.0 (mm Hg).



Σχήμα 3. Κατανομή C/Co της LDL α) στο ενδοθήλιο θωρακικής αορτής από την πλευρά του τοιχώματος, β) και γ) εγκάρσια τοιχώματος (πολλές τομές) μαζί με τις «προβληματικές» περιοχές, δ) και ε) εγκάρσια τοιχώματος (πολλές τομές και μία τομή αντίστοιχα) χωρίς τις «προβληματικές» περιοχές, στ) γεωμετρία της περιοχής εξέτασης για τοιχωματική διαφορά πίεσης 70.0 (mm Hg).

Όσον αφορά στη συγκέντρωση της LDL στο ενδοθήλιο από την πλευρά του τοιχώματος, παρουσιάζονται αυξημένες τιμές στις περιοχές εκείνες στις οποίες οι αντίστοιχες τιμές της συγκεντρώσεως στο ενδοθήλιο του αυλού είναι υψηλές και αντίστροφα. Το ζητούμενο τώρα είναι η κατανόηση της επίδρασης των περιοχών με μη-φυσιολογική κατανομή αθηροσκληρωτικού υλικού δηλ. των περιοχών Calcium, Necrotic Core, Fibrous, Fibro Fatty, στην κατανομή της συγκεντρώσεως στο τοίχωμα. Στο Σχήμα 3 παρατηρείται τοπική συσσώρευση της συγκεντρώσεως γύρω από τις «προβληματικές» περιοχές, ασβέστιο (Calcium) και ινώδες (Fibrous). Συγκεκριμένα, η αυξομείωση του συντελεστή ειδικής διαπερατότητας k_p από περιοχή σε περιοχή μέσα στο τοίχωμα έχει ως αποτέλεσμα τη συσσώρευση των μακρομορίων ακριβώς γύρω από τις περιοχές εκείνες που εμφανίζουν χαμηλό συντελεστή ειδικής διαπερατότητας k_p και το αντίστροφο. Στην προκειμένη περίπτωση οι «προβληματικές» περιοχές λαμβάνουν μηδενική τιμή για το συντελεστή ειδικής διαπερατότητας k_p και παρατηρείται αύξηση της συγκεντρώσεως LDL ανάντη της προβληματικής περιοχής. Αυτό φαίνεται χαρακτηριστικά στο Σχήμα 4.

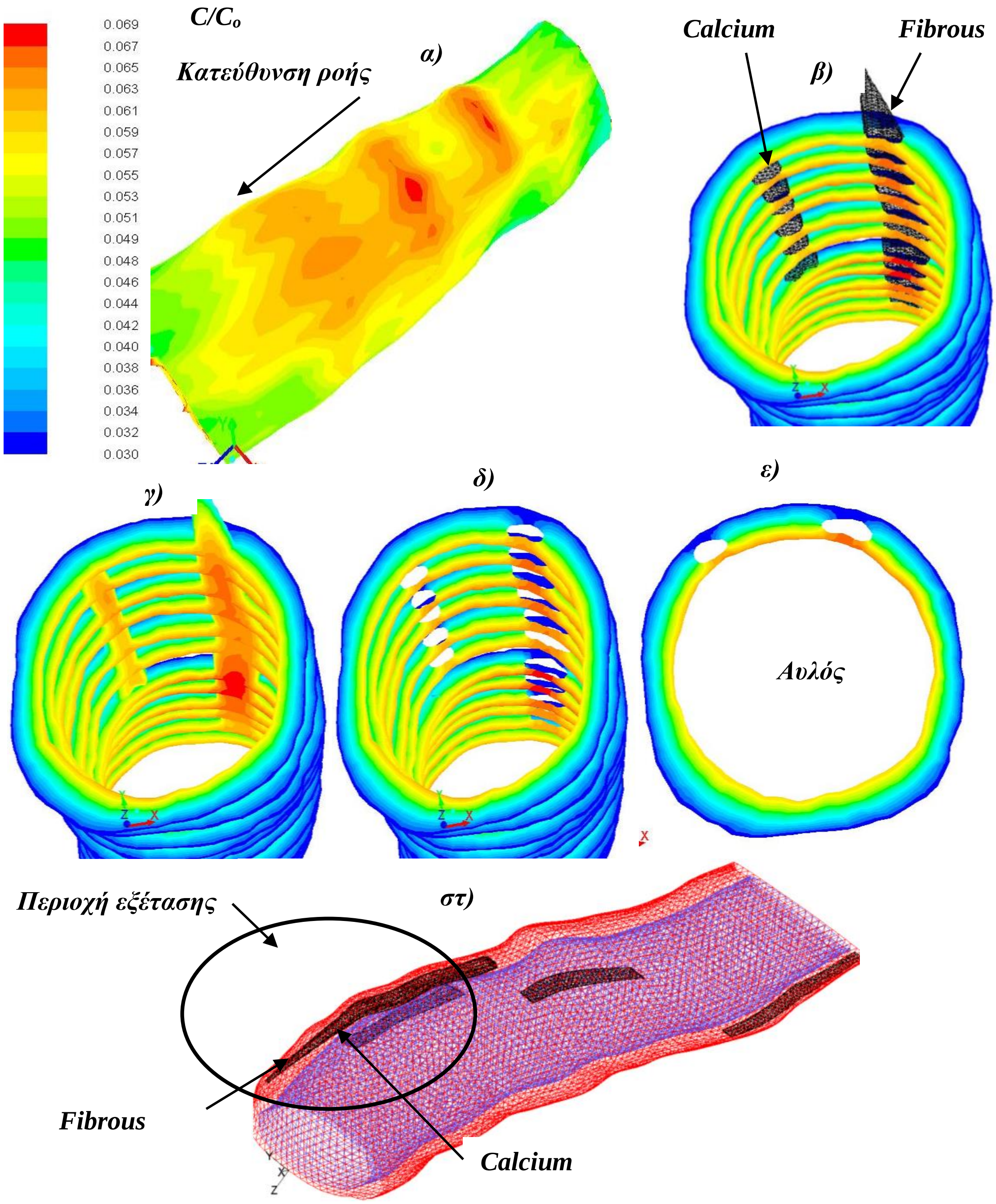


Σχήμα 4. α) Ισουψείς C/Co της LDL εγκάρσια τοιχώματος (μία τομή) χωρίς τις «προβληματικές» περιοχές, β) κατανομή της C/Co κατά μήκος της τομής (γραμμή) για τοιχωματική διαφορά πίεσης 70.0 (mm Hg).

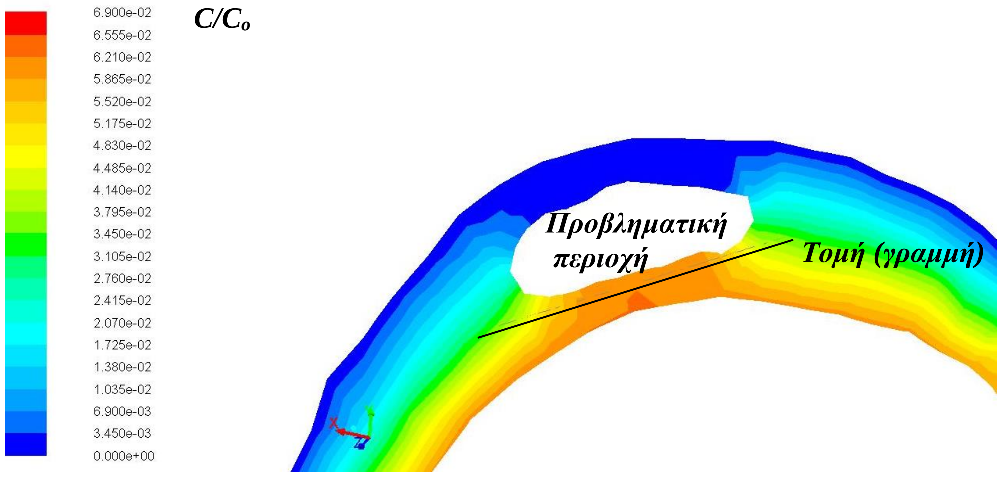
Όσο μεγαλώνει ο όγκος των περιοχών αυτών με μη-φυσιολογική κατανομή του αθηροσκληρωτικού υλικού τόσο μεγαλύτερη συσσώρευση των μακρομορίων παρατηρείται γύρω από τις περιοχές αυτές επιδεινώνοντας ακόμα περισσότερο την κατάσταση.

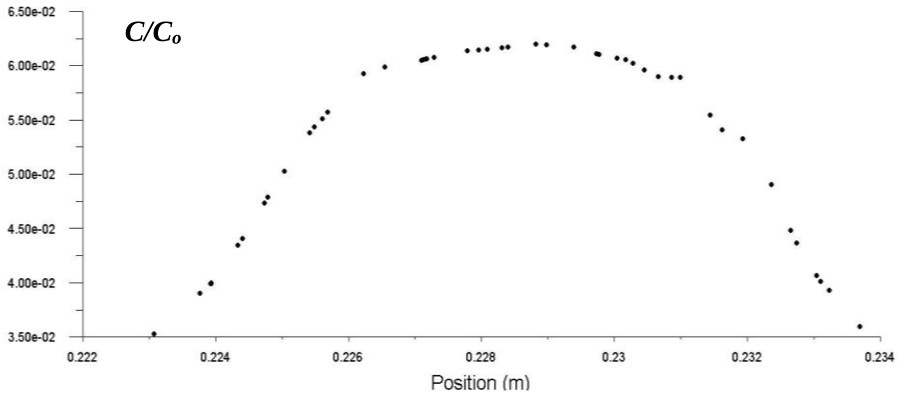
3.2 Αποτελέσματα με τοιχωματική διαφορά πιέσεως 120.0 (mm Hg)

Αναλύεται η κατανομή της συγκεντρώσεως στον αυλό αλλά και μέσα στο τοίχωμα με τοιχωματική διαφορά πιέσεως 120.0 (mm Hg). Αυξάνοντας την τοιχωματική διαφορά πίεσης αυξάνεται και η συγκέντρωση της LDL στο ενδοθήλιο του αυλού. Συγκεκριμένα για τοιχωματική διαφορά πίεσης 70.0 (mm Hg), η μέγιστη τιμή της συγκεντρώσεως της LDL είναι για τη θωρακική αορτή 1.636 (gr/l) ενώ για τοιχωματική διαφορά πίεσης 120.0 (mm Hg) είναι 1.715 (gr/l). Όσον αφορά στη συγκέντρωση της LDL στο τοίχωμα, Σχήμα 5, η τιμή της συγκεντρώσεως στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου του τοιχώματος για τοιχωματική διαφορά πιέσεως 120.0 (mm Hg) είναι κοντά 10 φορές μεγαλύτερη από την αντίστοιχη τιμή για τοιχωματική διαφορά πιέσεως 70.0 (mm Hg) δυσχεραίνοντας την κατάσταση και εντείνοντας το φαινόμενο της αθηρο-σκλήρωσης. Στο Σχήμα 6 δείχνεται η τοπική συσσώρευση της συγκεντρώσεως της LDL γύρω από τις «προβληματικές» περιοχές.



Σχήμα 5. Κατανομή C/Co της LDL α) στο ενδοθήλιο θωρακικής αορτής από την πλευρά του τοιχώματος, β) και γ) εγκάρσια τοιχώματος (πολλές τομές) μαζί με τις «προβληματικές» περιοχές, δ) και ε) εγκάρσια τοιχώματος (πολλές τομές και μία τομή αντίστοιχα) χωρίς τις «προβληματικές» περιοχές, στ) γεωμετρία της περιοχής εξέτασης για τοιχωματική διαφορά πίεσης 120.0 (mm Hg).





Σχήμα 6. α) Ισουψείς C/Co της LDL εγκάρσια τοιχώματος (μία τομή) χωρίς τις «προβληματικές» περιοχές, β) κατανομή της C/Co κατά μήκος της τομής (γραμμή) για τοιχωματική διαφορά πίεσης 120.0 (mm Hg)

5. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε το τοίχωμα μιας θωρακικής αορτής με μη-φυσιολογική κατανομή αθηροσκληρωτικού υλικού στο τοίχωμα. Πραγματοποιήθηκε ανακατασκευή της 3D γεωμετρίας με χρήση λογισμικών, έγινε διακριτοποίηση του πεδίου ροής και στη συνέχεια αριθμητική επίλυση. Η υδραυλική αγωγιμότητα ελήφθη ως συνάρτηση της τοιχωματικής διατμητικής τάσης ώστε να ερευνηθεί η επίδραση της τελευταίας στη μεταφορά της LDL στο αρτηριακό τοίχωμα. Το αποτέλεσμα ήταν ότι σε περιοχές με χαμηλή τοιχωματική διατμητική τάση παρουσιάζεται συσσώρευση της LDL τόσο στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου του αυλού όσο και στη διεπιφάνεια του ενδοθηλίου του τοιχώματος. Όσον αφορά στις προβληματικές περιοχές, αυτές επιτείνουν τη συσσώρευση μακρομορίων λόγω της διαφορετικής σύστασης (μηδενικό συντελεστή ειδικής διαπερατότητας) που έχουν και συγκεκριμένα ανάντη των περιοχών αυτών παρατηρείται έντονη συσσώρευση. Τέλος, μελετήθηκε η επίδραση της διατοιχωματικής πίεσης στην κατανομή της LDL και όπως φάνηκε η αύξησή της επιφέρει σημαντική αύξηση της συγκεντρώσεως της LDL (10 φορές). Επομένως, ο συνδυασμός, χαμηλή τοιχωματική διατμητική πίεση-υψηλή διατοιχωματική πίεση, ανάντη μιας προβληματικής περιοχής π.χ. ασβεστίου ενέχει σοβαρούς κινδύνους για την υγεία. Περαιτέρω έρευνα σε κυτταρικό επίπεδο χρησιμοποιώντας πιο ρεαλιστικές γεωμετρίες των προβληματικών περιοχών θα μπορούσαν να δώσουν πιο ακριβή ποσοτική ανάλυση στη μεταφορά της LDL μέσα στο αρτηριακό τοίχωμα.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

R.L. Bratzler, G.M. Chisolm, C.K. Colton (1977), .The distribution of labeled low-density lipoproteins across the rabbit thoracic aorta in vivo., Atherosclerosis, 28, p. 289.

S. Chung, K. Vafai (2012),.Effect of the fluid–structure interactions on low-density lipoprotein transport within a multi-layered arterial wall., Journal of Biomechanics, 45, p.371.

G. Karner, K. Perktold, H.P. Zehentner (2001), .Computational modeling of macromolecule transport in the arterial wall., Comput. Methods., Biomech. Biomed.Engin., 4, p. 491.

G. Karner, K. Perktold (2000),.Effect of endothelial injury and increased blood pressure on albumin accumulation in the arterial wall: a numerical study., J. Biomech., 33, p.709.

U. Olgac, V. Kurtcuoglu, D. Poulikakos (2008), .Computational modeling of coupled blood-wall mass transport of LDL:effects of local wall shear stress., AJP - Heart and Circulatory Physiology, 294, p. H909.

M. Prosi, P. Zunino, K. Perktold and A. Quarteroni (2005), .Mathematical and numerical models for transfer of low-density lipoproteins through the arterial wall: a new methodology for the model set up with applications to the study of disturbed lumenal flow., J. Biomech., 38, p. 903.

G. Rappitsch,K. Perktold (1996),.Pulsatile albumin transport in large arteries: a numerical simulation study., Journal of Biomechanical Engineering, 118, p.511.

H. Samady, P. Eshtehardi, M.C. McDaniel, J. Suo, S.S. Dhawan, C. Maynard, L.H. Timmins, A.A. Quyyumi, D.P. Giddens (2011), .Coronary artery wall shear stress is associated with progression and transformation of atherosclerotic plaque and arterial remodeling in patients with coronary artery disease.,Circulation, 124, p. 779.

N. Sun, R. Torii, N.B. Wood, A.D. Hughes, S.A. Thom, X.Y. Xu (2006), .Fluid-wall modelling of ldl transport in a human right coronary artery., Proceedings of the COMSOL Users Conference, Birmingham (UK).

N. Sun, N.B. Wood, A.D. Hughes, S.A. Thom, X.Y. Xu (2006), .Fluid-wall modelling of mass transfer in an axisymmetric stenosis:effects of shear-dependent transport properties., Annals of Biomedical Engineering, 34, p. 1119.

N. Sun, N.B. Wood, A.D. Hughes, S.A. Thom, X.Y. Xu (2007), .Effects of transmural pressure and wall shear stress on LDL accumulation in the arterial wall: a numerical study using a multilayered model., Am J Physiol Heart Circ Physiol, 292, p. H3148.

N. Sun, N.B. Wood, A.D. Hughes, S.A. Thom, X.Y. Xu (2007), .Influence of pulsatile flow on LDL transport in the arterial wall., Annals of Biomedical Engineering, 35, p. 1782.

G.A. Truskey, W.L. Roberts, R.A. Herrmann, R.A. Malinauskas (1992), .Measurement of endothelial permeability to 125l-low density lipoproteins in rabbit arteries by use of en face preparations., Circulation Research, 71, p. 883.

S. Wada, T. Karino (2000), .Computational study on LDL transfer from flowing blood to arterial walls., Clinical applications of computational mechanics to the cardiovascular system, Springer, Berlin, p.p. 157-173.

S. Wada, T. Karino (2002),.Theoretical prediction of low-density lipoproteins concentration at the luminal surface of an artery with a multiple bend., Biomedical Engineering Society, Ann Biomed Eng., 30, p.778.

N. Yang, K. Vafai (2006),.Modeling of low-density lipoprotein (LDL) transport in the artery-effects of hypertension., International Journal of Heat and Mass Transfer, 49, p. 850.

Σύγκριση ροϊκών πεδίων σε ανθρώπινη αορτή, με προσομοίωση χρήσης δύο διαφορετικών αορτικών βαλβίδων TAVI

Αναστάσιος Κοπανίδης, PhD[1,2], Ιωάννης Πάντος, MSc[2,3], Νικόλαος Αλεξόπουλος, MD,[2] Ανδρέας Θεοδωρακάκος, PhD,[4] Ευστάθιος Ευσταθόπουλος, PhD,[3] Δημοσθένης Κατρίτσης, MD, PhD, FRCP[2]

[1]Τμ. Μηχανολόγων Μηχανικών, Παν/μιο Δυτικής Μακεδονίας, Μπακόλα & Σιαλβέρα, 501 00, Κοζάνη, Ελλάς, tkopanidis@uowm.gr
[2]Καρδιολογική Κλινική, Ευρωκλινική Αθηνών, Αθανασιάδου 9, 115 21, Αθήνα, Ελλάς, dkatritsis@euroclinic.gr
[3]Τμήμα Ιατρικής Φυσικής και Ακτινοφυσικής, Β' Εργαστήριο Ακτινολογίας, Παν/μιο Αθηνών, Αθήνα, Ελλάς, ipantos@gmail.com
[4]Τμ. Μηχανολογίας, ΤΕΙ Πειραιά, Π. Ράλλη & Θηβών 250, 122 44, Αιγάλεω, Αθήνα, Ελλάς, atheod@teipir.com

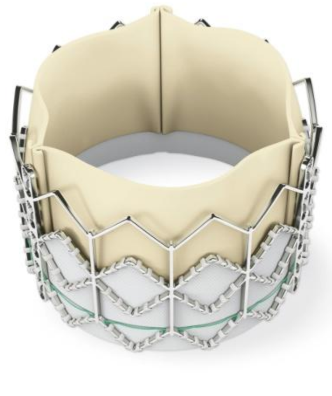
ΠΕΡΙΛΗΨΗ
Η στένωση αορτής είναι μία από τις πιο διαδεδομένες μορφές καρδιαγγειακής νόσου στον δυτικό κόσμο και αντιπροσωπεύει την πιο κοινή μορφή βαλβιδικής καρδιακής νόσου που απαιτεί χειρουργική επέμβαση. Η διαδερμική εμφύτευση βιοπροθετικών βαλβίδων (TAVI) δια μέσω καθετήρα (αντί του ανοικτού χειρουργείου) εξελίσσεται γρήγορα με ελπιδοφόρα αποτελέσματα σε ανεγχείρητους ασθενείς ή σε ασθενείς υψηλού κινδύνου. Ωστόσο μέχρι τώρα δεν έχει περιέλθει εις γνώσιν μας κάποια μελέτη που να αφορά τα ροϊκά φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα, τόσο μέσα στις βαλβίδες, όσο και στο πεδίο που δημιουργείται κατάντι αυτών μετά την εμφύτευσή τους. Πολλώ δε μάλλον, δεν υπάρχουν συγκριτικές μελέτες μεταξύ των 2 εμπορικών βαλβίδων που κυκλοφορούν. Σε αυτή τη μελέτη γίνεται παρουσίαση 2 μοντέλων διαφορετικών βαλβίδων σε 3 φάσεις λειτουργίας της κάθε μίας και συγκρίνονται τα εξαγόμενα προσομοίωσης που αφορούν στις ροϊκές παραμέτρους που επηρεάζουν τόσο τη λειτουργία του μυοκαρδίου, όσο και το συνολικό αιμοδυναμικό σύστημα καρδιάς-αορτικής βαλβίδας-αορτικού τόξου. Τα αποτελέσματα δε δείχνουν σημαντικές διαφορές στις σοβαρότερες των παραμέτρων, ωστόσο καταδεικνύουν ότι η διαφορετική γεωμετρία κάθε μιας από τις 2 βαλβίδες, έχει άμεσο αντίκτυπο στην εικόνα του πεδίου ροής που συνδιαμορφώνουν κάθε φορά, ενώ δείχνουν ότι πρέπει να λαμβάνεται υπόψιν και η καταπόνηση των φύλλων της κάθε βαλβίδας.

Λέξεις Κλειδιά: βιοπροσθετικές βαλβίδες, αορτικές βαλβίδες, ροή σε αορτή, υπολογιστική ρευστοδυναμική, εμβιο-μηχανική

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η στένωση της αορτής είναι μία από τις πιο διαδεδομένες μορφές καρδιαγγειακής νόσου στον δυτικό κόσμο και αντιπροσωπεύει την πιο κοινή μορφή βαλβιδικής καρδιακής νόσου που απαιτεί χειρουργική επέμβαση (Dweck, *et al.*,2012, Maganti, *et al.*,2010). Η διαδερμική εμφύτευση βιοπροθετικών βαλβίδων δια μέσω καθετήρα εξελίσσεται γρήγορα με ελπιδοφόρα αποτελέσματα σε ανεγχείρητους ασθενείς ή σε ασθενείς υψηλού κινδύνου (Khatri *et al.,2013*- Makkar *et al.*,2012). Αν και αρκετές βαλβίδες είναι υπό μελέτη, οι πλέον ευρέως χρησιμοποιούμενοι τύποι μέχρι τώρα είναι η βαλβίδα Edwards SAPIEN (Edwards Lifesciences Inc, Irvine, CA) η οποία είναι μια τρίφυλλη βαλβίδα από περικάρδιο βοοειδών τοποθετημένη σε ένα σκελετό κοβαλτίου- χρωμίου, και η βαλβίδα CoreValve (Medtronic, Minneapolis, MN), η οποία είναι μια τρίφυλλη βαλβίδα από περικάρδιο χοίρων τοποθετημένη σε ένα αυτοδιογκούμενο σκελετό νικελίου-τιτανίου (Εικ. 1). Μελέτες έχουν δείξει ότι οι διαφορές όσον αφορά την ενδονοσοκομειακή θνητότητα και τα εμβολικά εγκεφαλικά επεισόδια δεν είναι σημαντικές μεταξύ των δύο βαλβίδων (Generaux, 2013, Genereux *et al.*,2012). Αντιθέτως, σημαντική παλινδρόμηση της αορτικής βαλβίδας (βαθμού ≥3) και η ανάγκη για μόνιμη βηματοδότηση είναι πιο συχνές στην περίπτωση της βαλβίδας CoreValve, ενώ η απόφραξη στεφανιαίας αρτηρίας είναι πιο συχνή στην περίπτωση της βαλβίδας SAPIEN (Generaux,2013, Ribeiro *et al.*,2013). Αν και οι περισσότερες από αυτές τις διαφορές μπορούν να αποδοθούν σε δομικά χαρακτηριστικά των βαλβίδων, η λειτουργική συμπεριφορά και τα αιμοδυναμικά χαρακτηριστικά των βαλβίδων δεν είναι γνωστά και δεν υπάρχουν in vivo ή in vitro σχετικά δεδομένα. Ωστόσο, τα χαρακτηριστικά της αορτικής ροής συσχετίζονται με φαινόμενα όπως η αγγειακή αναδιαμόρφωση, η βλάβη του αγγειακού τοιχώματος, η θρόμβωση και τα αγγειακά ανευρύσματα. Τα χαρακτηριστικά της αορτικής ροής μπορούν να μελετηθούν με τη μέθοδο της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής σε αντιπροσωπευτικά θεωρητικά μοντέλα των βαλβίδων (Kodali *et al.*,2012, Dwyer *et al.*, 2009, Sirois & Sun,2011).

Ο σκοπός της παρούσας μελέτης ήταν να χρησιμοποιήσει την υπολογιστική ρευστοδυναμική προκειμένου να αναλυθούν και να συγκριθούν τα αιμοδυναμικά χαρακτηριστικά των συστημάτων CoreValve και SAPIEN. Για το σκοπό αυτό θεωρήθηκε ένα αορτικό μοντέλο χωρίς παθολογίες και δημιουργήθηκαν δύο αορτικά μοντέλα στα οποία ενσωματώθηκαν οι βιοπροσθετικές βαλβίδες. Με την εφαρμογή κατάλληλων οριακών συνθηκών εισροής και εκροής ερευνήσαμε τις διαφοροποιήσεις της αορτικής ροής στα δύο μοντέλα και τη συσχέτισή τους με παθολογικά φαινόμενα όπως η αγγειακή αναδιαμόρφωση, οι βλάβες του αγγειακού τοιχώματος και η θρόμβωση.



α)

β)

Εικ.1: α) Η τεχνητή αορτική βαλβίδα (TAVI) SAPIEN XT, Edwards, β) η βαλβίδα CoreValve της Medtronic,

2. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΡΟΗΣ ΜΕ ΤΕΧΝΗΤΗ ΑΟΡΤΙΚΗ ΒΑΛΒΙΔΑ

2.1 Κατασκευή τοπολογίας αορτής ασθενούς

Η γεωμετρία της αορτής που επιλέχθηκε, προέρχεται από ασθενή χωρίς παθολογικά χαρακτηριστικά και εξήχθη με τη μέθοδο της υπολογιστικής (CT) στεφανιογραφίας στην Ευρωκλινική Αθηνών. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιήθηκε CT scanner 128-τομών (Aquilion CX, Toshiba, Tokyo, Japan) με πάχος τομής 0.5mm. Οι τομές ξεκινούσαν από το επίπεδο των κόλπων του Valsalva μέχρι την κατιούσα αορτή και η τοπολογία περιελάμβανε τα κατώτερα επίπεδα της βραχιοκεφαλικής, αριστερής υποκλείδιας και αριστερής καρωτίδας αρτηρίας. Οι τομές που εξήχθησαν αριθμούσαν τις 360 και χρησιμοποιήθηκαν για τη δομημένη ανακατασκευή της τοπολογίας της αορτής με τη βοήθεια εμπορικού πακέτου (Amira 4.0, Mercury Computer Systems). Το τρισδιάστατο μοντέλο της αορτής και των κλάδων παρήχθη αυτόματα και εφαρμόστηκαν φίλτρα για βελτίωση των ατελειών από το επιφανειακό στο 3D μοντέλο.

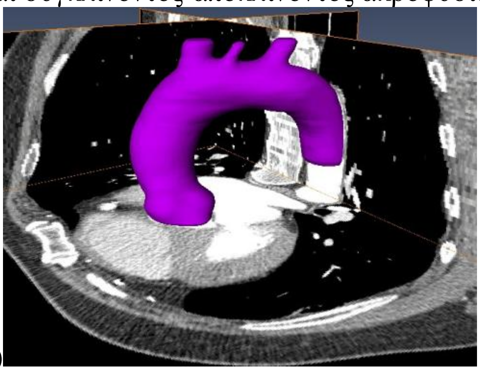
2.2 Κατασκευή τοπολογίας βαλβίδων

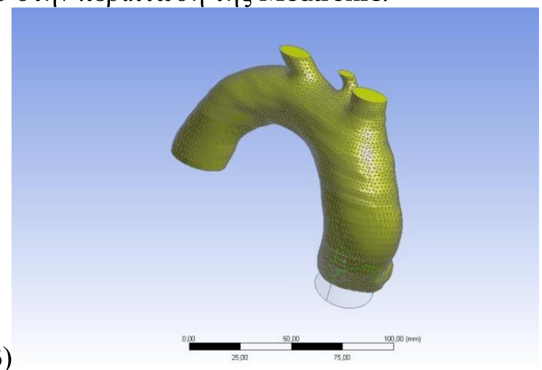
Επιλέχθηκαν οι 2 περισσότερο χρησιμοποιούμενες τεχνητές αορτικές βαλβίδες που υπάρχουν στην παγκόσμια αγορά. Αυτές ήταν η διογκούμενη με αεροφόρο σάκο Edwards SAPIEN XT (Edwards Lifesciences, Irvine, CA, USA) και η αυτοδιογκούμενη CoreValve (Medtronic Inc, Minneapolis, MN, USA). Η κάθε βαλβίδα αποτελείται από το μεταλλικό σκελετό, που διογκώνεται στην ονομαστική διάμετρο μετά την τοποθέτησή της και από τα κινούμενα φύλλα που επιτρέπουν τη ροή του αίματος συμφασικά με τον παλμό της καρδιάς (μηχανική κίνηση).

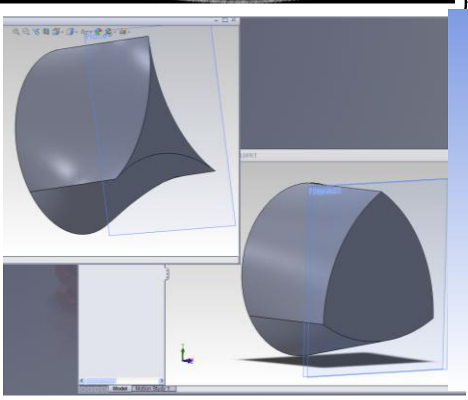
Η ψηφιακή κατασκευή των βαλβίδων βασίστηκε στις πραγματικές διαστάσεις και μορφολογικές ιδιότητες τους, όπως δίδονται από τους κατασκευαστές τους και από δημοσιεύσεις μελετών στη διεθνή βιβλιογραφία. Για την κατασκευή τους χρησιμοποιήθηκε το σχεδιαστικό CAD-CAE πακέτο SolidWorks 2010. Το σχήμα των προσομοιωμένων βαλβίδων ακολουθούσε πιστά το σχήμα των μεταλλικών σκελετών κάθε μιας, ενώ οι ονομαστικές διάμετροι κάθε μοντέλου ήταν 29mm, καθιστώντας τες συγκρίσιμες με το αντίστοιχο μοντέλο της αυτής διαμέτρου που αντιστοιχεί σε κάθε μία.

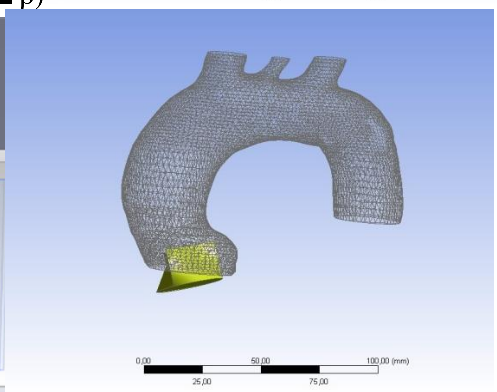
Κατά τη μοντελοποίηση κατασκευάστηκαν 3 μοντέλα για κάθε βαλβίδα, που αντιστοιχούν σε 3 διακριτές στιγμές της συνεχούς λειτουργίας της και αναπαριστούν τη θέση των φύλλων της βαλβίδας στη συγκεκριμένη στιγμή. Συγκεκριμένα για τη βαλβίδα Edwards οι θέσεις αντιστοιχούσαν στο 1/3, 2/3 και 3/3 (τελείως ανοικτή) της πλήρους ονομαστικής διαμέτρου της, ενώ για την περίπτωση της βαλβίδας Corevalve οι ίδιες μορφές ανοίγματος αντιστοιχούσαν σε λίγο μικρότερα ποσοστά καθώς το επίπεδο των φύλλων βρίσκεται λίγο χαμηλότερα από το επίπεδο της ονομαστικής διαμέτρου σε αυτή.

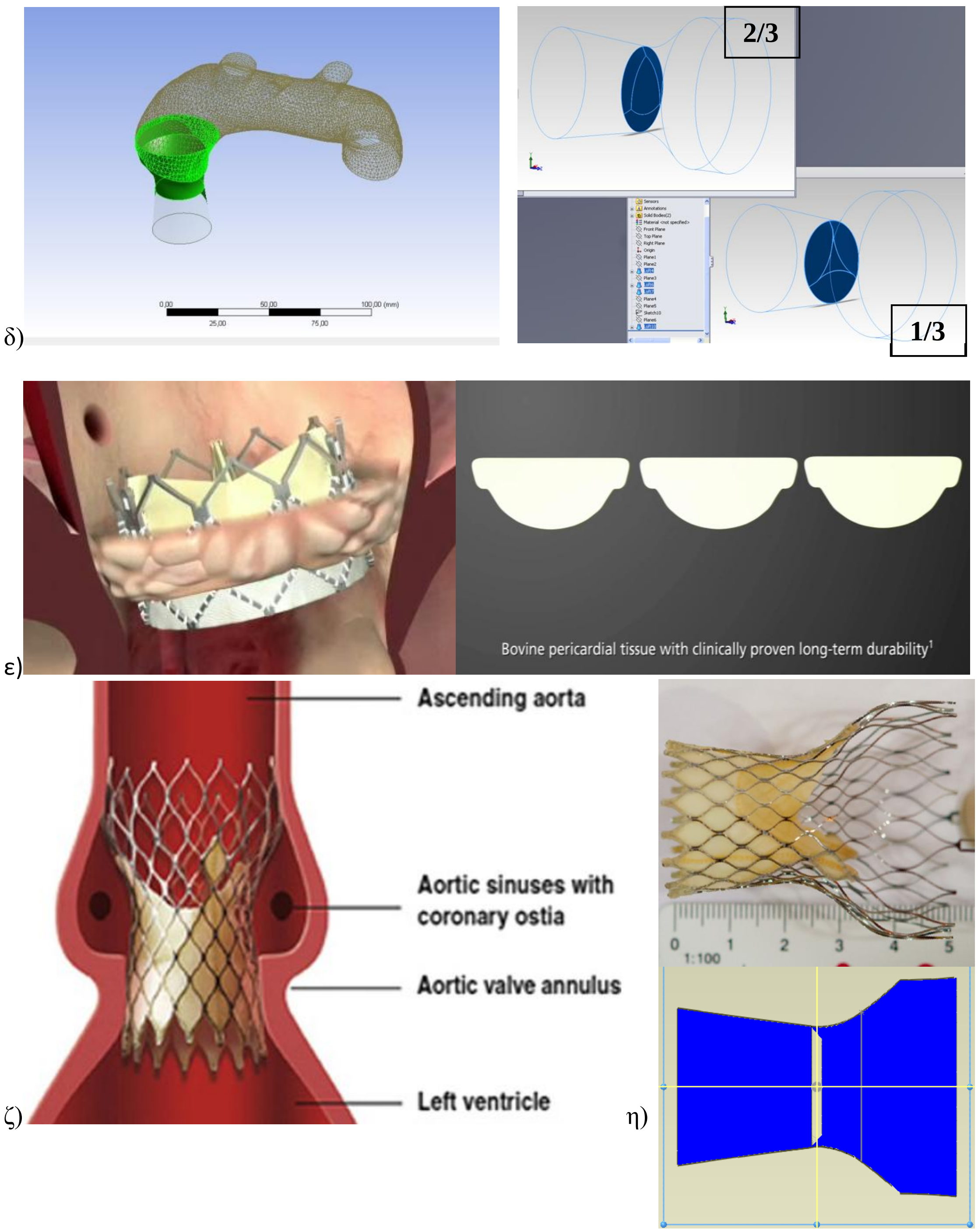
Σε κάθε βαλβίδα ο μεταλλικός σκελετός αντικαταστάθηκε από τοίχωμα, καθώς μετά την τοποθέτησή της, ο οργανικός ιστός στον οποίο προσφύεται, λειτουργεί στεγανωτικά σαν εξωτερικό στεγανό τοίχωμα. Η μορφολογία των φύλλων ήταν επίσης σε συμφωνία με τις βιβλιογραφικές αναφορές και τα δεδομένα του κάθε κατασκευαστή και αναπαριστούσε την τοπολογία των φύλλων στις 3 διακριτές φάσεις λειτουργίας που επιλέχθηκαν. Στην περίπτωση της βαλβίδας Corevalve της Medtronic, οι διαστάσεις που χρειάστηκαν είχαν επιπλέον μετρηθεί από διαθέσιμη λειτουργική βαλβίδα που παραχωρήθηκε από την εταιρεία. Για τη γεωμετρία των φύλλων χρησιμοποιήθηκε καμπυλόγραμμο σχήμα («χτενιού» ή «βεντάλιας») αντίστοιχο της κάθε στιγμής που αφορούσε, ενώ η τοπολογία του τοιχώματος (stent) στο οποίο συνδέονταν ήταν κυλινδρική για την περίπτωση της βαλβίδας Edwards και συγκλίνοντος-αποκλίνοντος ακροφυσίου στην περίπτωση της Medtronic.

α) 

β) 

γ) 

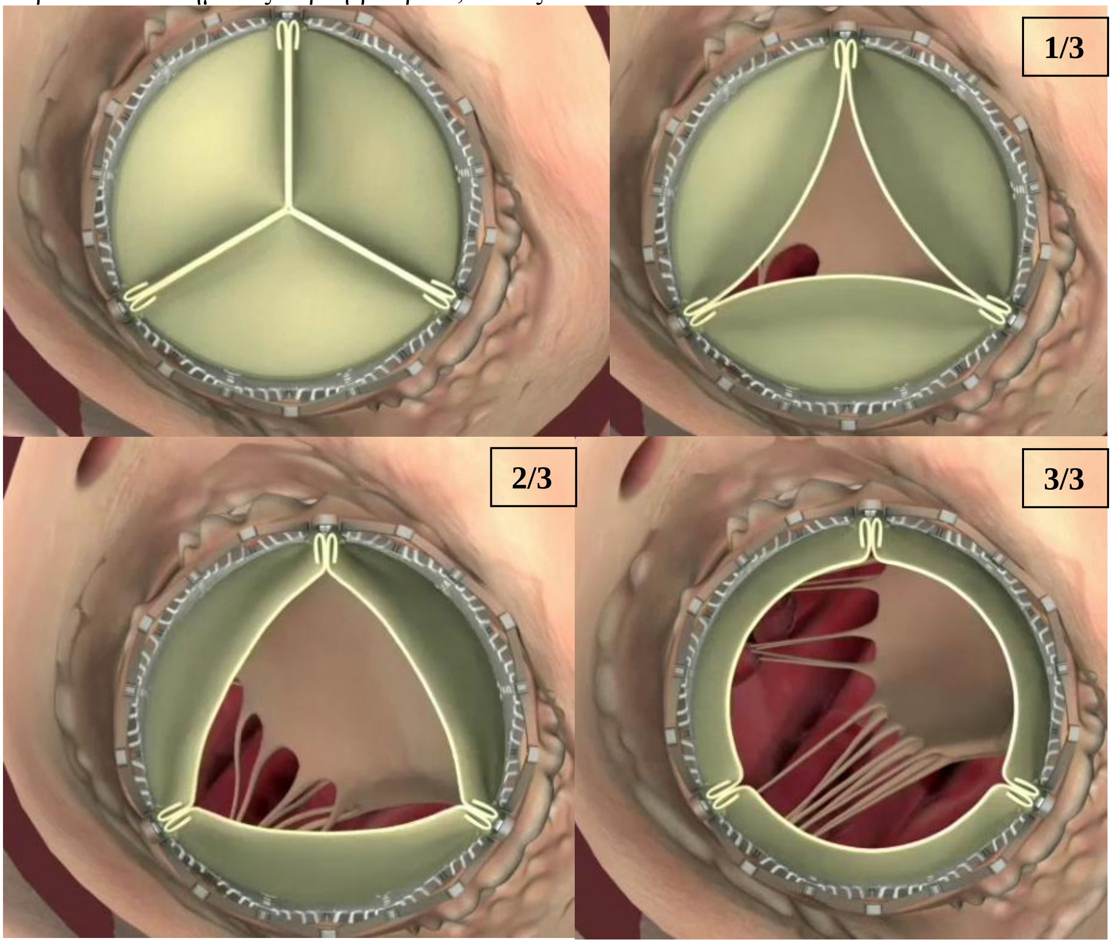




Εικ. 2: α) 3D αποτύπωση της αορτής ασθενούς που εξήχθη με χρήση CT στεφανιογραφίας β) επανα-κατασκευή της τοπολογίας της αορτής με τη χρήση CAD-CAE πακέτων γ) τοποθέτηση φάσης λειτουργίας για άνοιγμα 1/3 της βαλβίδας Edwards SAPIEN XT στην αορτή δ) κατασκευή μοντέλου ανοίγματος 1/3 και 2/3 & τοποθέτηση της βαλβίδας Corevalve της Medtronic ε) γράφημα της θέσης λειτουργίας και των φύλλων της βαλβίδας Edwards SAPIEN XT ζ) αντίστοιχο γράφημα της βαλβίδας Corevalve Medtronic η) μέτρηση και κατασκευή μοντέλου για τη βαλβίδα Corevalve Medtronic

2.3 Διακριτοποίηση και τοποθέτηση:

Καθένα από τα 3 μοντέλα κάθε βαλβίδας τοποθετήθηκε σαν ξεχωριστή περίπτωση στην ίδια γεωμετρία της αορτής του ασθενούς. Αυτό έγινε ευθυγραμμίζοντας αρχικά τον επιμήκη άξονα της βαλβίδας με αυτόν της αορτής στο επίπεδο των κόλπων του Valsalva κι έπειτα ταυτίζοντας το επίπεδο των φύλλων όταν είναι κλειστά με το κατώτατο επίπεδο των κόλπων του Valsalva. Μετά το πέρας της κατασκευής του υπολογιστικού όγκου, έγινε διακριτοποίηση της κατασκευής με χρήση εμπορικού πακέτου (ANSYS). Χρησιμοποιήθηκε υβριδικό πλέγμα διάστασης κελιού $2{,}7\times10^{-5}$ m, ενώ για τη μελέτη ανεξαρτησίας πλέγματος χρησιμοποιήθηκαν 3 διαφορετικά πλέγματα μεγέθους $1{,}6\times10^{5}$, $1{,}8\times10^{6}$ και $4{,}0\times10^{6}$ κελιών, που οδήγησαν σε διαφορές 3,5% και 5% σε ότι αφορά την πτώση πίεσης μεταξύ του μεσαίου πλέγματος και των ακραίων. Το συγκεκριμένο μέγεθος κελιού που επιλέχθηκε (μεσαίο), παρήγαγε πλέγματα που κυμαίνονταν μεταξύ $1{,}2\times10^{6}$ – $2{,}0\times10^{6}$ κελιών, αφού κάθε φορά η γεωμετρία του συστήματος αορτή-βαλβίδα, άλλαζε.

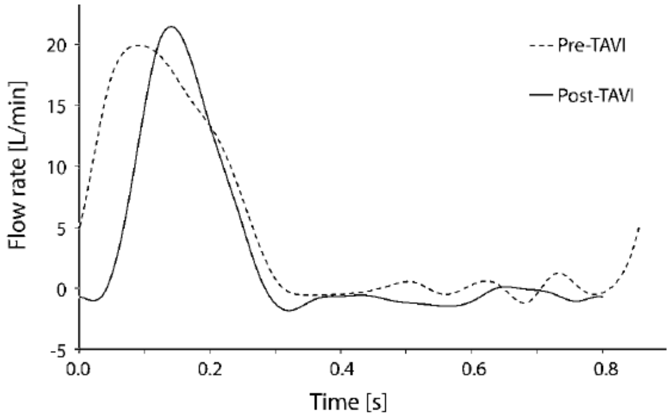


Εικ. 3: Γράφημα της βαλβίδας Edwards SAPIEN XT με τη βαλβίδα κλειστή και τις 3 στιγμιαίες ιδιομορφές των φύλλων της που μοντελοποιούνται στην παρούσα. Οι αντίστοιχες μορφές μοντελοποιήθηκαν και για τη λειτουργία της βαλβίδας Corevalve Medtronic

2.4 Μοντελοποίηση ροής:

Αφ’ής στιγμής δεν ήταν δυνατή στα πλαίσια του έργου η κατασκευή κινουμένων πλεγμάτων μεταβλητής γεωμετρίας που θα μπορούσαν να ακολουθούν τη συνεχή κίνηση των φύλλων της βαλβίδας κατά της διάρκεια του παλμού, επιλέχθηκε η προσέγγιση της επίλυσης πεδίου μόνιμης ροής για κάθε στιγμή που αναπαριστούσε η εκάστοτε τοπολογία που μελετούνταν, πρακτική που έχει χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν για προβλήματα βιολογικών ροών (Sun *et al.* , 2010, Li & Sun, 2010). Εφαρμόστηκαν οι κατάλληλες συνθήκες παροχής μάζας για κάθε στιγμή, χρησιμοποιώντας παλμό παροχής αίματος, μετρημένο in vivo με τη μέθοδο της μαγνητικής τομογραφίας αντίθετης φάσης (PC-MRI) (Kodali *et al.*,2010). Δεν εφαρμόστηκε κάποιο μοντέλο τύρβης, καθώς η ροή θεωρήθηκε στρωτή. Ωστόσο, ο αριθμός Re κυμαινόταν από 1808 έως και 4820, με μήκος αναφοράς τη διάμετρο εισόδου της βαλβίδας, θέτοντας τις 2 τελευταίες ροές κάθε τύπου βαλβίδας στην τυρβώδη περιοχή για ροή σε κυλινδρικό σωλήνα. Παρόλα αυτά, λόγω των απότομων κλίσεων που εισήγαγε η συνεχής εναλλαγή της γεωμετρίας (είσοδος βαλβίδας, φύλλα, στεφάνη εξόδου, αορτή) και λόγω της πολυπλοκότητας αυτής καθεαυτής της αορτής, δεν κατέστη δυνατό να σταθεροποιηθεί η λύση με τη χρήση κάποιου μοντέλου τύρβης αν και δοκιμάστηκαν τόσο το μοντέλο k-ε, όσο και το SST k-ω.

Οι οριακές συνθήκες που επιβλήθηκαν αφορούσαν σε κάθε περίπτωση στην επιβολή της παροχής μάζας που αντιστοιχεί στη στιγμή που αντιπροσώπευε το άνοιγμα της βαλβίδας, ενώ οι συνθήκες στις διάφορες εξόδους επέβαλαν το διαμοιρασμό της παροχής μάζας με βάση το νόμο του Murray, σύμφωνα με τον οποίο, σε μία διακλάδωση, η ροή διαμοιράζεται με βάση το λόγω των διαμέτρων των δύο κλάδων, υψωμένο εις την 3/2 (Reneman &Hoeks, 2008). Ο Πίνακας 1 παρουσιάζει τις παροχές εισόδου και τα ποσοστά εξόδου σε κάθε περίπτωση προσομοίωσης. Οι παρειές της βαλβίδας και τα φύλλα, όπως αναφέρθηκε, αντιμετωπίστηκαν σαν τοίχωμα. Το αίμα θεωρήθηκε Νευτώνειο και ασυμπίεστο ρευστό με δυναμικό ιξώδες μ= 3,50 mPa·s και πυκνότητα ρ= 1060 kg/m^3 (Tan *et al.*, 2012).



Εικ. 4: Ο παλμός των Tan et al, 2012 που χρησιμοποιήθηκε για να εξαχθεί η μάζα εισόδου κάθε φάσης έκαστης βαλβίδας (Post-TAVI κυματομορφή)

		Mass outflow fraction pet outlet			
Simulated case	Mass inflow (Kg/s)	BCA*	LCCA†	LSA‡	DESC§
Edwards1/3	0.195	9.7%	1.0%	8.0%	81.3%
Edwards 2/3	0.311				
Edwards 3/3	0.384				
Medtronic 1/3	0.144				
Medtronic 2/3	0.212				
Medtronic 3/3	0.384				

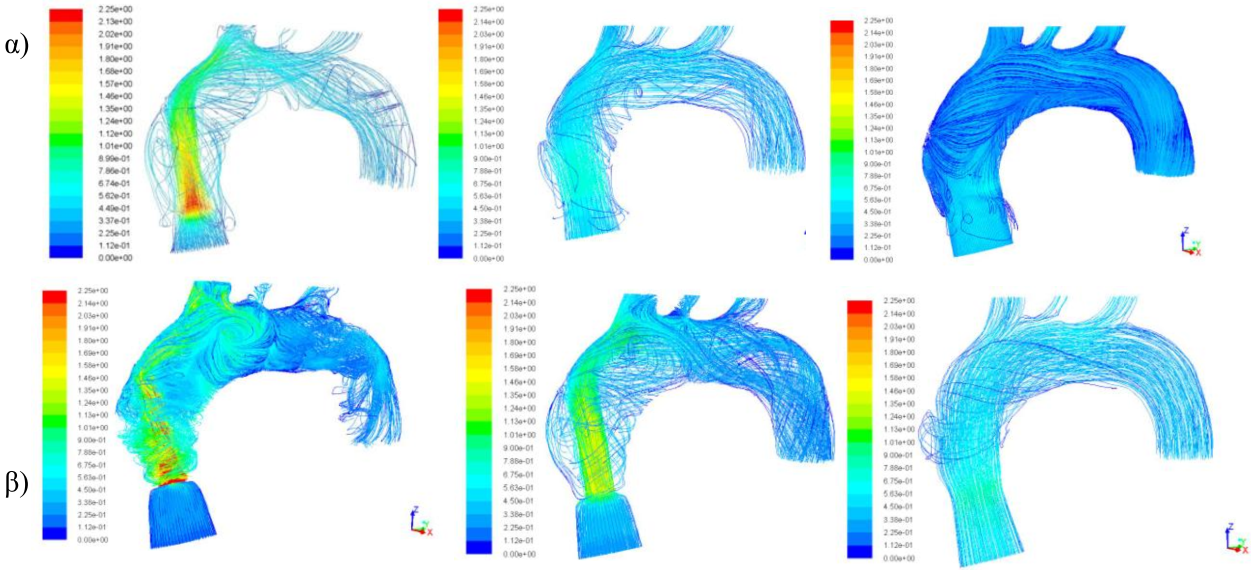
Πιν. 1: Ποσοστά εκροής και παροχή μάζας εισόδου για κάθε μία περίπτωση ανοίγματος βαλβίδας που μοντελοποιήθηκε.

2.5 Ροϊκές παράμετροι:

Εξήχθησαν και εκτιμήθηκαν εκείνες οι ροϊκές παράμετροι που ενδιαφέρουν από κλινική σκοπιά και θεωρούνται σχετικές με επιβλαβή φαινόμενα προκαλούμενα από τη ροή, όπως θρόμβωση, καταστροφή αγγειακού τοιχώματος, ανεπάρκεια βαλβίδας και μελετήθηκε ο αντίκτυπος της εμφύτευσης στο φορτίο του μυοκαρδίου.

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στην περίπτωση ανοίγματος 1/3 της διατομής κάθε βαλβίδας, παρατηρούνται υψηλότερες ταχύτητες σε μεγαλύτερες αποστάσεις κατάντι της εξόδου της βαλβίδας Medtronic (Εικ.5). Ως εκ τούτου, η ροή του αίματος προσκρούει στα τοιχώματα του αγγείου της ανιούσας αορτής με υψηλότερη ταχύτητα και σχηματίζεται δίνη στο αορτικό τόξο μεταξύ της βραχιοκεφαλικής αρτηρίας και της αριστερής καρωτίδας αρτηρίας. Η αντίστοιχη δίνη δεν παρατηρείται στην περίπτωση της βαλβίδας Edwards, πιθανόν λόγω διαφορετικής γεωμετρίας: η έξοδος της Medtronic είναι λίγο ψηλότερα μέσα στην αορτή σε σχέση με την αντίστοιχη της Edwards. Έτσι στην 1^{η} περίπτωση η ροή εισέρχεται στην καμπύλη του αορτικού τόξου με υψηλότερες τιμές ταχύτητας, ενώ στη 2^{η} περίπτωση περισσότερο εξομαλυμένη. Η εικόνα του πεδίου στην περίπτωση ανοίγματος βαλβίδας 2/3, είναι παρόμοια και για τους δύο τύπους αν και οι ταχύτητες είναι χαμηλότερες σε όλο το χωρίο. Η δίνη που σχηματίστηκε στο προηγούμενο στιγμιότυπο, υφίσταται ακόμη για τη βαλβίδα Medtronic, ωστόσο με χαμηλότερη ταχύτητα και με λιγότερα σωματίδια αίματος να εμπλέκονται σε αυτή, υποδεικνύοντας πως εξομαλύνεται η κίνηση της ροής. Στην τελευταία φάση του πλήρως ανοίγματος της βαλβίδας (3/3), η ροή είναι σαφώς ομαλότερη, χωρίς ανακυκλοφορίες και με ακόμη χαμηλότερες τιμές ταχυτήτων.



Εικ. 5: α) ροϊκές γραμμές για τις 3 φάσεις μοντελοποίησης της βαλβίδας Edwards SAPIEN XT β) αντίστοιχα αποτελέσματα για τη βαλβίδα Corevalve Medtronic

Σε ότι αφορά τις διατμητικές τάσεις που υφίσταται το τοίχωμα του αγγείου (WSS), φαίνεται να υπάρχει ομοιοτυπία στην κατανομή και στο μέτρο τους για τις περιπτώσεις των 2 βαλβίδων. Στο άνοιγμα 1/3φαίνεται να είναι υψηλότερες οι τιμές των WSS στο εξωτερικό του αορτικού τόξου σε σχέση με το εσωτερικό του και την κατιούσα αορτή. Εμφανή είναι δύο σημεία υψηλότερων τάσεων και για τις 2 περιπτώσεις στην ανιούσα αορτή και το αορτικό τόξο «απέναντι» από το άνοιγμα της βαλβίδας. Στην περίπτωση όπου το άνοιγμα κάθε βαλβίδας είναι 2/3, οι WSS εμφανίζουν περισσότερο ομοιόμορφη κατανομή με χαμηλότερες τιμές, ωστόσο στην περίπτωση της Medtronic είναι ακόμη εμφανή τα ίδια σημεία συγκέντρωσης WSS. Τέλος, στην περίπτωση της πλήρους ανοικτής διατομής για κάθε βαλβίδα, η κατανομή των WSS ήταν παρόμοια μεταξύ των 2 βαλβίδων και ομαλότερη, χωρίς την παρουσία διακριτών χαρακτηριστικών. Γενικά η βαλβίδα της Medtronic παρουσιάζει υψηλότερους μέσους όρους WSS σε κάθε περίπτωση, με τη διαφορά να είναι έως και 1,5 φορά μεγαλύτερη από της Edwards στις περιπτώσεις ανοίγματος 1/3 και 2/3. Σε ότι αφορά τα φύλλα της κάθε βαλβίδας, εκεί μπορεί να λεχθεί πως η διακύμανση των WSS είναι μεγάλη (1,8-15,2 Pa) γεγονός που εξηγείται από τις διάφορες μορφές που αυτά παίρνουν κατά τη διάρκεια της συνεχούς τους κίνησης και των απότομων κλίσεων που αυτές συνεπάγονται.

Η πτώση πίεσης που υπολογίστηκε, εμφανίζεται σταθερά χαμηλότερη, όχι σημαντικά, για την περίπτωση της βαλβίδας Edwards, σε σχέση με την αντίστοιχη της Medtronic για κάθε περίπτωση ανοίγματος των φύλλων. Η χαμηλή πτώση πίεσης προκρίνεται από αιμοδυναμικής άποψης σε ότι αφορά τη συμπεριφορά του συστήματος βαλβίδα-αορτή επειδή συνεπάγεται χαμηλό φορτίο για το μυοκάρδιο. Η μεγαλύτερη πτώση πίεσης εμφανίζεται μεταξύ ανιούσας και κατιούσας αορτής (198.0 Pa και 218. 0 Pa για τη βαλβίδα Edwards και τη Medtronic αντίστοιχα). Οι μέγιστες διαφορές στην πτώση πίεσης μεταξύ των 2 βαλβίδων είναι 9% για την κατιούσα αορτή, 21% για την βραχιοκεφαλική αρτηρία (BCA), 6% για την αριστερή καρωτίδα αρτηρία (LCCA) και 7% για την αριστερή υποκλείδια αρτηρία (LSA).

4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η αορτική ροή στις δύο περιπτώσεις που μελετήθηκαν είναι γενικά παρόμοιες, ωστόσο διάφορες παραλλαγές είναι επίσης εμφανείς. Οι παραλλαγές αυτές οφείλονται στη διαφορετική γεωμετρία και των δύο βαλβίδων. Η βαλβίδα της Medtronic έχει ψηλότερο προφίλ και η έξοδος της βαλβίδας είναι υψηλότερα σε σχέση με τη βαλβίδα της Edwards, αν και οι δύο βαλβίδες εμφυτεύονται έτσι ώστε το εγκάρσιο επίπεδο που ορίζεται από τα κλειστά φύλλα της βαλβίδας να βρίσκεται στην ίδια θέση. Αυτή η γεωμετρική διαφοροποίηση σε συνδυασμό με τις υψηλότερες ταχύτητες εκροής της βαλβίδας της Medtronic οδηγεί στο σχηματισμό ενός μεγαλύτερου στροβίλου ροής ο οποίος μάλιστα διατηρείται για μεγαλύτερο χρονικό διάστημα. Οι υψηλές διαβαλβιδικές ταχύτητες ροής είναι ένας από τους σημαντικότερους παράγοντες που συμβάλλουν στην ανευρυσματική διαστολή της θωρακικής αορτής επιδρώντας στο επίπεδο των μεταλλοπρωτεϊνάσων στον αγγειακό τοίχωμα (El-Hamamsy & Yacoub, 2009). Ομοίως με τα ευρήματά μας, μια προηγούμενη μελέτη με MRI σε ασθενή μετά από εμφύτευση βαλβίδας Edwards αποκάλυψε ασύμμετρη συστολική ροή με ένα τζετ ροής να σχηματίζεται κατά μήκος του εξωτερικού τοιχώματος της ανιούσας αορτής και την πρόκληση στροβίλου ροής (Markl *et al.*, 2012). Τα ευρήματα αυτά παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον υπό το πρίσμα μιας πρόσφατης μελέτης σε ασθενείς υψηλού κινδύνου με σοβαρή στένωση της αορτής, η οποία έδειξε ότι η διαδερμική εμφύτευση βαλβίδας δια μέσω καθετήρα οδήγησε σε πιο συχνές παλινδρομήσεις της αορτικής βαλβίδας σε σχέση με τη χειρουργική αντικατάσταση οι οποίες πιθανώς να σχετίζονται με τη λιγότερο επιτυχημένη ευθυγράμμιση της βαλβίδας (Smith *et al.* ,2011). Η κατανομή του WSS μετά την διαδερμική εμφύτευση βαλβίδας έχει επίσης ενδιαφέρον, δεδομένου ότι μπορεί να επηρεάσει τις ενδοθηλιακές και βιολογικές λειτουργίες του αορτικού τοιχώματος. Σε αυτή τη μελέτη υψηλότερες τιμές WSS και για τις δύο βαλβίδες σημειώθηκαν στο ανώτερο τμήμα της ανιούσας αορτής και το αορτικό τόξο. Τα αποτελέσματα αυτά είναι σύμφωνα με τα αποτελέσματα προηγούμενης μελέτης η οποία συνέκρινε την αορτική ροή σε δίφυλλες και τρίφυλλες αορτικές βαλβίδες και η οποία διαπίστωσε ότι οι μέγιστες τιμές WSS εντοπίζονται στο μέσο της ανιούσας αορτής λόγω της τοπικής επίδρασης του διαβαλβιδικού τζετ (Viscardi *et al.*,2010). Τα αποτελέσματα μας αναφορικά με τις μέσες τιμές WSS είναι υψηλότερα από τις αντίστοιχες προηγούμενων μελετών στις οποίες ο μέσος όρος του WSS ήταν <1.0Pa (Kodali *et al.*,2010, Frydrychowicz *et al.*,2009, Wentzel, *et al.*,2005). Ωστόσο, στις μελέτες αυτές υπολογίσθηκε το μέσο WSS σε όλη τη διάρκεια του καρδιακού κύκλου και έτσι συνυπολογίστηκαν και χρονικές στιγμές κατά τη διάρκεια του κλεισίματος της βαλβίδας κατά τις οποίες η ροή του αίματος ελαχιστοποιείται και άρα μειώνονται οι τιμές του WSS. Οι υπολογιζόμενες μέσες τιμές WSS στη μελέτη μας είναι σε μια περιοχή η οποία προκαλεί ενδοθηλιακή ηρεμία και ένα προφίλ έκφρασης γονιδίου προφύλαξης από την αθηροσκλήρωση (Malek *et al.*,1999), και όχι αρκετά υψηλές για να προκαλέσουν αποδόμηση του αρτηριακού τοιχώματος με πιθανό αποτέλεσμα την ανευρυσματική αναδιαμόρφωση του αγγείου (Elefteriades,2008). Προηγούμενες πειραματικές και υπολογιστικές μελέτες της αιματικής ροής έχουν δείξει ότι οι υψηλές τιμές του WSS προκαλούν την ενεργοποίηση των αιμοπεταλίων και η μακροχρόνια έκθεσή τους σε αυτές σε συνδυασμό με την επανακυκλοφορία της ροής ευνοούν την δημιουργία θρόμβου (Nicosia *et al.*, 2003). Σε συμφωνία και με προηγούμενη μελέτη (Morsi, *et al.*, 2007) δείξαμε ότι το WSS στα φύλλα της βαλβίδας αυξάνεται σταδιακά από τη βάση προς την κορυφή του φύλλου και μεγιστοποιείται στο άκρο του φύλλου, σημείο στο οποίο η επιτάχυνση της αξονικής ροής μεγιστοποιείται. Επιπλέον οι κατανομές WSS στα φύλλα της βαλβίδας που παρουσιάζονται στην παρούσα μελέτη έδειξαν σαφώς πολύπλοκα σχήματα ανάπτυξης κατά τη διάρκεια του ανοίγματος της βαλβίδας, τα οποία θεωρούνται ότι προκαλούν σταδιακή καταπόνηση και αστοχία των φύλλων με την πάροδο του χρόνου (Morsi, *et al.*, 2007). Η ενεργοποίηση των αιμοπεταλίων στην περιοχή της βιοπροσθετικής βαλβίδας ενισχύεται λόγω των τοπικών πολύπλοκων συνθηκών ροής (Bluestein, *et al.*,2002, Sabbah & Stein, 1982). Τα ενεργοποιημένα αιμοπετάλια με μεγάλο χρόνο παραμονής σε αυτές τις περιοχές ενδέχεται να πολλαπλασιαστούν και να συναθροιστούν, οδηγώντας τη δημιουργία ελεύθερων εμβόλων (Bluestein *et al.*,2002, Bluestein *et al.*,2000). Εμείς δεν μελετήσαμε την ενεργοποίηση των αιμοπεταλίων, επειδή αυτό απαιτεί την μελέτη των τροχιών των σωματιδίων και την ανάλυση της διάρκειας της έκθεσής τους σε υψηλές διατμητικές τάσεις κατά τη διάρκεια του καρδιακού κύκλου. Ωστόσο, πολύ υψηλοί ρυθμοί διάτμησης της τάξης των $10000 s^{-1}$ που αντιστοιχούν σε διατμητικές καταπονήσεις 35Pa μπορούν να προκαλέσουν την άμεση ενεργοποίηση των αιμοπεταλίων (Kaufmann, *et al.*, 2011). Αν και οι μέσες τάσεις διατμήσεως στα φύλλα της βαλβίδας που υπολογίστηκαν στη μελέτη αυτή είναι σημαντικά χαμηλότερες, υπάρχουν κάποια «θερμά σημεία »στα οποία η διατμητική τάση είναι μεγαλύτερη από 35Pa και για τις δύο βαλβίδες.

5. ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ

Τα αποτελέσματα της μελέτη μας δείχνουν ότι οι συνθήκες ροής στην αορτή μετά την προσομοίωση εμφύτευσης αορτικών βαλβίδων μέσω καθετήρα μπορεί να αξιολογηθεί με μεθόδους υπολογιστικής ρευστοδυναμικής. Η μεθοδολογία αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην πρόβλεψη των συνθηκών ροής και στην επιλογή της κατάλληλης βαλβίδας.

Blood streamlines comparison at patient-specific aorta, with the use of 2 different simulated TAVI valves.

Abstract

The functional behavior and hemodynamic characteristics of percutaneously implanted bioprosthetic valves are not known. The objective of this study is to evaluate aortic flow conditions after the simulated implantation of two of the most widely used bioprosthetic valves, the Edwards SAPIEN, and the Medtronic CoreValve, at the same patient-specific aorta geometry, by using computational fluid dynamics (CFD) analysis. The simulated implantation on models that resemble the two valves results in different aortic flow conditions. Vortex formation at the upper ascending aorta is more persistent in the case of the simulated Medtronic valve. Ranges of average wall shear stress values are 2.4 – 3.5 Pa for Edwards and 3.0 – 5.3 Pa for Medtronic; the calculated WSS values induce endothelial quiescence and an atheroprotective setting at both valves. The average shear stress on the simulated valve leaflets are low, however hot-spots are present at both valves (155.0 Pa for Edwards and 250.0 Pa for Medtronic) which are in theory capable to cause platelet activation and thus promote thrombosis. The pressure drops along the aorta are slightly lower for Edwards compared to Medtronic (198.0 Pa versus 218.0 Pa). The presented method allows assessment of aortic flow conditions following implantation of bioprosthetic valves. It may be useful in predicting detrimental flow phenomena and thus facilitating the selection of appropriate valve designs.

Keywords: bioprosthetic valves, aortic flow, computational fluid dynamics

Βιβλιογραφία

[1] M. R. Dweck, *et al.*, "Calcific aortic stenosis: a disease of the valve and the myocardium," *J Am Coll Cardiol,* vol. 60, pp. 1854-63, Nov 6 2012.

[2] K. Maganti*, et al.*, "Valvular heart disease: diagnosis and management," *Mayo Clin Proc,* vol. 85, pp. 483-500, May 2010.

[3] P. Khatri*, et al.*, "Adverse effects associated with transcatheter aortic valve implantation: a meta-analysis of contemporary studies.," *Ann Intern Med. ,* vol. 158, pp. 35-46. , 2013

[4] S. K. Kodali*, et al.*, "Two-year outcomes after transcatheter or surgical aortic-valve replacement," *N Engl J Med,* vol. 366, pp. 1686-95, May 3 2012.

[5] R. R. Makkar*, et al.*, "Transcatheter aortic-valve replacement for inoperable severe aortic stenosis," *N Engl J Med,* vol. 366, pp. 1696-704, May 3 2012.

[6] P. Generaux, "Paravalvular Leak After Transcatheter Aortic Valve Replacement: The New Achilles' Heel? A Comprehensive Review of the Literature " *JACC,* pp. E-Pub, 2013.

[7] P. Genereux*, et al.*, "Clinical outcomes after transcatheter aortic valve replacement using valve academic research consortium definitions: a weighted meta-analysis of 3,519 patients from 16 studies," *J Am Coll Cardiol,* vol. 59, pp. 2317-26, Jun 19 2012.

[8] H. B. Ribeiro*, et al.*, "Predictive factors, management, and clinical outcomes of coronary obstruction following transcatheter aortic valve implantation: insights from a large multicenter registry," *J Am Coll Cardiol,* vol. 62, pp. 1552-62, Oct 22 2013.

[9] H. A. Dwyer, *et al.*, "Computational fluid dynamics simulation of transcatheter aortic valve degeneration," *Interact Cardiovasc Thorac Surg,* vol. 9, pp. 301-8, Aug 2009.

[10] E. Sirois and W. Sun, "Computational evaluation of platelet activation induced by a bioprosthetic heart valve," *Artif Organs,* vol. 35, pp. 157-65, Feb 2011.

[11] W. Sun, *et al.*, "Simulated elliptical bioprosthetic valve deformation: implications for asymmetric transcatheter valve deployment," *J Biomech,* vol. 43, pp. 3085-90, Dec 1 2010.

[12] K. Li and W. Sun, "Simulated thin pericardial bioprosthetic valve leaflet deformation under static pressure-only loading conditions: implications for percutaneous valves," *Ann Biomed Eng,* vol. 38, pp. 2690-701, Aug 2010.

[13] R. S. Reneman and A. P. Hoeks, "Wall shear stress as measured in vivo: consequences for the design of the arterial system," *Med Biol Eng Comput,* vol. 46, pp. 499-507, May 2008.

[14] F. Tan, *et al.*, "Comparison of Aortic Flow Patterns Before and After Transcatheter Aortic Valve Implantation," *Cardiovascular Engineering and Technology,* vol. 3, pp. 123-135, 2012.

[15] I. El-Hamamsy and M. H. Yacoub, "Cellular and molecular mechanisms of thoracic aortic aneurysms," *Nat Rev Cardiol,* vol. 6, pp. 771-86, Dec 2009.

[16] M. Markl, *et al.*, "Three-dimensional blood flow alterations after transcatheter aortic valve implantation," *Circulation,* vol. 125, pp. e573-5, Apr 17 2012.

[17] C. R. Smith, *et al.*, "Transcatheter versus surgical aortic-valve replacement in high-risk patients," *N Engl J Med,* vol. 364, pp. 2187-98, Jun 9 2011.

[18] F. Viscardi, *et al.*, "Comparative finite element model analysis of ascending aortic flow in bicuspid and tricuspid aortic valve," *Artif Organs,* vol. 34, pp. 1114-20, Dec 2010.

[19] A. Frydrychowicz, *et al.*, "Three-dimensional analysis of segmental wall shear stress in the aorta by flow-sensitive four-dimensional-MRI," *J Magn Reson Imaging,* vol. 30, pp. 77-84, Jul 2009.

[20] J. J. Wentzel, *et al.*, "Does shear stress modulate both plaque progression and regression in the thoracic aorta? Human study using serial magnetic resonance imaging," *J Am Coll Cardiol,* vol. 45, pp. 846-54, Mar 15 2005.

[21] A. M. Malek, *et al.*, "Hemodynamic shear stress and its role in atherosclerosis," *JAMA,* vol. 282, pp. 2035-42, Dec 1 1999.

[22] J. A. Elefteriades, "Thoracic aortic aneurysm: reading the enemy's playbook," *Curr Probl Cardiol,* vol. 33, pp. 203-77, May 2008.

[23] M. A. Nicosia, *et al.*, "A coupled fluid-structure finite element model of the aortic valve and root," *J Heart Valve Dis,* vol. 12, pp. 781-9, Nov 2003.

[24] Y. S. Morsi, *et al.*, "Transient fluid-structure coupling for simulation of a trileaflet heart valve using weak coupling," *J Artif Organs,* vol. 10, pp. 96-103, 2007.

[25] D. Bluestein, *et al.*, "Free emboli formation in the wake of bi-leaflet mechanical heart valves and the effects of implantation techniques," *J Biomech,* vol. 35, pp. 1533-40, Dec 2002.

[26] H. N. Sabbah and P. D. Stein, "Fluid dynamic stresses in the region of a porcine bioprosthetic valve," *Henry Ford Hosp Med J,* vol. 30, pp. 134-8, 1982.

[27] D. Bluestein, *et al.*, "Vortex shedding as a mechanism for free emboli formation in mechanical heart valves," *J Biomech Eng,* vol. 122, pp. 125-34, Apr 2000.

[28] T. A. Kaufmann, *et al.*, "Transient, three-dimensional flow field simulation through a mechanical, trileaflet heart valve prosthesis," *ASAIO J,* vol. 57, pp. 278-82, Jul-Aug 2011.

Ταχείς υπολογισμοί διαβροχής σε υπερυδρόφοβες επιφάνειες με σχεδιασμένη μορφολογία

Γ. Πάσχος[1], Γ. Κόκκορης[1, 2], Α.Γ. Μπουντουβής[1]
[1]Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ
[2]Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος
gpashos@chemeng.ntua.gr, g.kokkoris@inn.demokritos.gr, boudouvi@chemeng.ntua.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Προτείνεται μέθοδος υπολογισμού μονοπατιών ελάχιστης ενέργειας (Minimum Energy Paths – MEPs) για μεταβολές καταστάσεων διαβροχής (μεταβάσεις) σε υπερυδρόφοβες επιφάνειες με μορφολογία. Η μέθοδος συνδυάζει μία τροποποιημένη μέθοδο phase-field με την απλοποιημένη μέθοδο χορδής και εφαρμόζεται σε δύο τύπους μετάβασης μίας σταγόνας σε συστοιχία αυλακιών ορθογωνικής διατομής. Κατά τον πρώτο τύπο, η σταγόνα ξεκινώντας από την υπερυδρόφοβη κατάσταση Cassie-Baxter, εισχωρεί σταδιακά στα υποκείμενα αυλάκια. Κατά τον δεύτερο τύπο μετάβασης, η σταγόνα μετατοπίζεται οριζοντίως, όπου σταδιακά αποκολλάται από την ανάντη (πίσω) και προσκολλάται στην κατάντη (μπροστινή) προεξοχή της μορφολογίας. Τα ενεργειακά φράγματα και των δύο μεταβάσεων μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την αξιολόγηση της υπερυδροφοβικότητας των επιφανειών: Υψηλά ενεργειακά φράγματα μετάβασης από την υπερυδρόφοβη Cassie-Baxter στην υδρόφιλη Wenzel υποδηλώνουν ανθεκτικές υπερυδρόφοβες επιφάνειες και παρομοίως χαμηλά ενεργειακά φράγματα οριζόντιας μετατόπισης υποδηλώνουν υψηλή ευκινησία σταγόνων.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Σταγόνες σε υπερυδρόφοβες επιφάνειες με σχεδιασμένη μορφολογία τείνουν να επικάθονται στις προεξοχές της μορφολογίας [Σχ. 1Α, κατάσταση διαβροχής Cassie-Baxter (CB)], ελαχιστοποιώντας έτσι την διεπιφάνειά τους με το στερεό. Η μικρή διεπιφάνεια επιτρέπει στις επικαθήμενες σταγόνες να ολισθαίνουν εύκολα, κάτι που είναι ιδιαίτερα επιθυμητό σε διάφορες τεχνολογικές εφαρμογές (αυτοκαθαριζόμενες επιφάνειες, μικρο-βαλβίδες, κτλ.) (Verho et al. 2012, Ellinas et al. 2011, Ellinas et al. 2014). Όμως η κατάσταση διαβροχής CB συχνά καταρρέει με την επιβολή διαταραχών, καθώς το σύστημα μεταπίπτει σε καταστάσεις όπου η σταγόνα διαβρέχει πλήρως τη μορφολογία [Σχ. 1C, κατάσταση διαβροχής Wenzel (W)], είτε μικρότερο τμήμα της (Σχ. 1B). Οι καταστάσεις όπου η σταγόνα διαβρέχει εσοχές της μορφολογίας είναι ανεπιθύμητες, αφού η σταγόνα είναι πρακτικά πακτωμένη (droplet pinning) λόγω της τοπικής προσκόλλησης στις εσοχές.
Για τη μελέτη των καταστάσεων διαβροχής επιφανειών με σχεδιασμένη μορφολογία (π.χ. μικρο-αυλάκια ή μικρο-κολώνες) προτείνεται υπολογιστική μέθοδος που βασίζεται σε μία τροποποιημένη μέθοδο phase-field (Pashos et al. 2014) για την αναπαράσταση συνόρων τριφασικών συστημάτων (αέρας-υγρό-στερεό). Η τελευταία συνδυάζεται με τη μέθοδο χορδής (string method) (E et al. 2002, E et al. 2007) για την εύρεση των μονοπατιών ελάχιστης ενέργειας (Minimum Energy Paths – MEPs) (Henkelman and Jonsson 2000, Henkelman et al. 2000). Το MEP αναπαριστά την ενεργειακά ευνοϊκότερη μετάβαση του συστήματος από μια αρχική κατάσταση ευσταθούς ισορροπίας (π.χ. σταγόνα επικαθήμενη σε προεξοχές) σε μια τελική κατάσταση ευσταθούς ισορροπίας (π.χ. πλήρης διαβροχή). Το MEP στο N-διάστατο χώρο της ενέργειας του συστήματος – όπου N οι βαθμοί ελευθερίας του συστήματος (degrees of freedom, DOFs) – συμπίπτει με την κοιλάδα που συνδέει τις καταστάσεις ευσταθούς ισορροπίας, οι οποίες αντιστοιχούν σε τοπικά ελάχιστα (Σχ. 2). Η ενέργεια που απαιτείται για τη μετάβαση A→B, ονομάζεται ενεργειακό φράγμα και υπολογίζεται ως η διαφορά των ενεργειών E_S-E_A, όπου S το ενεργειακό σάγμα – τα σάγματα αντιστοιχούν σε ασταθείς

καταστάσεις ισορροπίας. Υψηλές τιμές του ενεργειακού φράγματος υποδηλώνουν υψηλή αντίσταση σε διαταραχές που οδηγούν σε μεταβολές κατάστασεων διαβροχής. Οι ανθεκτικές υπερυδρόφοβες επιφάνειες χαρακτηρίζονται από υψηλά ενεργειακά φράγματα για τη μετάβαση από την κατάσταση CB στην W και ο στόχος της εργασίας είναι ο υπολογισμός αυτού του ενεργειακού φράγματος για σταγόνα επί σχεδιασμένης μορφολογίας (π.χ. συστοιχία αυλακιών). Συμπληρωματικά με τον υπολογισμό του φράγματος CB-W, η προτεινόμενη μεθοδολογία εφαρμόζεται στον υπολογισμό των ενεργειακών φραγμάτων οριζόντιας μετατόπισης σταγόνων που ποσοτικοποιούν την ευκινησία των σταγόνων πάνω σε επιφάνειες με μορφολογία.
Η αριθμητική επίλυση για τον προσδιορισμό του MEP είναι ταχεία αφού οι εξισώσεις της phase-field επιλύονται με ένα ημιπεπλεγμένο αριθμητικό σχήμα, μετασχηματισμένο στο χώρο των συχνοτήτων με χρήση ταχύ μετασχηματισμού Fourier (Fast Fourier Transform, FFT). Ο υπολογιστικός πυρήνας του ημιπεπλεγμένου σχήματος είναι κατάλληλα προσαρμοσμένος για να εκμεταλλεύεται τις αρχιτεκτονικές μαζικής πολυ-επεξεργασίας των σύγχρονων καρτών γραφικών (Graphics Processing Units – GPUs).

2. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΠΡΟΤΥΠΟΠΟΙΗΣΗ

2.1 Υπολογισμός καταστάσεων διαβροχής

Οι καταστάσεις διαβροχής υπολογίζονται με την τροποποιημένη μέθοδο phase-field, κατά την οποία η ενέργεια ανάμιξης του συστήματος, επαυξημένη με τη συνεισφορά της στερεάς φάσης, διατυπώνεται ως:

$$f_{mix}\left(\varphi,\nabla\varphi\right)=\frac{1}{2}\lambda\left|\nabla\varphi\right|^2+\frac{\left(1+a\right)}{2}\frac{\lambda}{4\varepsilon^2}\left(\varphi^2-1\right)^2+\frac{\left(1-a\right)}{2}\frac{\lambda}{2\varepsilon^2}k_s\left(\varphi-\varphi_s\right)^2, \quad (1)$$

όπου λ η πυκνότητα ενέργειας αναμίξης (mixing energy density) (Yue et al. 2004, Khatavkar et al. 2007), ε το εύρος τριχοειδούς αλληλεπίδρασης (capillary width) (Yue and Renardy 2013), k_s ο συντελεστής εφαρμογής του δυναμικού της στερεάς φάσης (Pashos et al. 2014) και α η παράμετρος που οριοθετεί τη στερεά φάση – α = -1 σε περιοχές του στερεού και α = 1 σε περιοχές αέρα/υγρού. Ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους της (1) αντιστοιχεί στη διεπιφανειακή ενέργεια και συνεισφέρει αισθητά στην (1) στην περιοχή μεγάλης κλίσης της συνάρτησης φ, η οποία οριοθετεί την υγρή φάση (φ = 1) και την αέρια φάση (φ = -1). Ο δεύτερος όρος είναι δυναμικό με δύο ελάχιστα (φ = 1, φ = -1), το οποίο αντιστοιχεί στην ενέργεια του κύριου όγκου των ρευστών, εξασφαλίζοντας τη μη αναμιξιμότητα αέρα και υγρού και εφαρμόζεται σε περιοχές που υφίσταται μόνο ρευστό (α = 1). Ο τρίτος όρος αντιστοιχεί στη συνεισφορά του στερεού στην ενέργεια του συστήματος και εφαρμόζεται σε περιοχές του στερεού, ως δυναμικό με ένα ελάχιστο για $\varphi = \varphi_s$, όπου φ_s η παράμετρος που συνδέεται άμεσα με τη διαβρεκτικότητα του στερεού και τη γωνία επαφής ή γωνία Young:

$$\theta_Y = 90^\circ(1-\varphi_s). \quad (2)$$

Η (2) προκύπτει ως εξής: Για φ_s = -1, η παρουσία του στερεού είναι ισοδύναμη με αυτή του αέρα, συνεπώς θ_Y = 180° και παρομοίως για φ_s = 1, θ_Y = 0°. Οι ενδιάμεσες τιμές οφείλουν να ακολουθούν γραμμική συσχέτιση.
Η ελεύθερη ενέργεια του συστήματος είναι το ολοκλήρωμα, ορισμένο στο υπολογιστικό χωρίο Ω, της ενέργειας ανάμιξης:

$$E\left(\varphi\right)=\int_\Omega\left(\frac{1}{2}\lambda\left|\nabla\varphi\right|^2+\frac{\left(1+a\right)}{2}\frac{\lambda}{4\varepsilon^2}\left(\varphi^2-1\right)^2+\frac{\left(1-a\right)}{2}\frac{\lambda}{2\varepsilon^2}k_s\left(\varphi-\varphi_s\right)^2\right)dV. \quad (3)$$

Το χωρίο, Ω, για τους σκοπούς της παρούσας εργασίας είναι διδιάστατο (Ω = [1, 1.5]) και εσωκλείει τις 3 φάσεις του συστήματος. Η παράγωγος του συναρτησιακού (3) δίνει το χημικό δυναμικό:

$$G=\frac{\lambda}{\varepsilon^2}\left(-\varepsilon^2\nabla^2\varphi+\frac{(1+a)}{2}\left(\varphi^2-1\right)\varphi+\frac{(1-a)}{2}k_s\left(\varphi-\varphi_s\right)\right) \quad (4)$$

Ο συντελεστής (1+α)/2 εξασφαλίζει την τοπικά επιλεκτική εφαρμογή του δυναμικού που παράγουν τα ρευστά, αλλά παράλληλα δυσχεραίνει την κατάστρωση ευσταθούς ημιπεπλεγμένου αριθμητικού σχήματος επίλυσης και συνεπώς η (4) τροποποιείται με την εξάλειψη του συντελεστή. Με την τροποποίηση, το δυναμικό που παράγουν τα ρευστά εφαρμόζεται σε ολόκληρο το υπολογιστικό χωρίο και έχει ως αποτέλεσμα την εσφαλμένη επιβολή του δυναμικού στο στερεό. Το σφάλμα διορθώνεται με την αντικατάσταση του φ_s από το φ_s', υπολογιζόμενο ως:

$$\varphi_s'=\frac{(\varphi_s^2-1)\varphi_s+k_s\varphi_s}{k_s}. \quad (5)$$

Η (5) προκύπτει από την (4), επιλέγοντας ένα τυχαίο σημείο της στερεάς φάσης (α = -1), εξαλείφοντας το συντελεστή (1+α)/2 και αντικαθιστώντας τα φ και φ_s με φ_s και φ_s', αντίστοιχα. Η τροποποιημένη (4) διατυπώνεται ως:

$$G=\frac{\lambda}{\varepsilon^2}\left(-\varepsilon^2\nabla^2\varphi+\varphi^3-\varphi+\frac{(1-a)}{2}k_s\left(\varphi-\varphi_s'\right)\right). \quad (6)$$

Σύμφωνα με τη διατύπωση της phase-field κατά Cahn-Hilliard, η χρονική εξέλιξη της φ έχει τη μορφή εξίσωσης συνέχειας:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\nabla\cdot\left(M\nabla G\right), \qquad (7)$$

όπου M η παράμετρος κινητικότητας των ρευστών (mobility) και για τους σκοπούς της παρούσας εργασίας είναι σταθερή και ίση με τη μονάδα. Η χρονική διακριτοποίηση της (7) πραγματοποιείται με ένα ημιπεπλεγμένο αριθμητικό σχήμα (Vollmayr-Lee and Rutenberg 2003):

$$\begin{aligned}&\varphi^{(n+1)}+\Delta\tau\nabla^2\left[\left(1-c_1\right)\varphi^{(n+1)}+\left(1-c_2\right)\varepsilon^2\nabla^2\varphi^{(n+1)}\right]=\\&\varphi^{(n)}+\Delta\tau\nabla^2\left[-c_1\varphi^{(n)}-c_2\varepsilon^2\nabla^2\varphi^{(n)}+\left(\varphi^{(n)}\right)^3+\frac{(1-a)}{2}k_s\left(\varphi^{(n)}-\varphi_s'\right)\right],\end{aligned} \qquad (8)$$

όπου $\Delta\tau=\lambda\Delta t/\varepsilon^2$ και Δt το χρονικό βήμα. Ο συντελεστής k_s εκφράζει το μέγεθος του δυναμικού της στερεάς φάσης και οι τιμές του πρέπει να είναι σχετικά μεγάλες για την επαρκή επιβολή του φ_s του στερεού. Δοκιμές έδειξαν ότι για k_s = 5 η τιμή του φ στο στερεό βρίσκεται ικανοποιητικά κοντά στη τιμή του φ_s. Οι συντελεστές c_1 και c_2 επηρεάζουν την ευστάθεια του αριθμητικού σχήματος. Για c_1 = 4, c_2 = 0, το αριθμητικό σχήμα είναι ευσταθές ανεξαρτήτως του Δt – για οσοδήποτε μεγάλα χρονικά βήματα το αριθμητικό σχήμα συγκλίνει.

2.2 Υπολογισμός MEP

Το MEP διακριτοποιείται ως μια κατά τμήματα γραμμική καμπύλη, γ, στο N-διάστατο χώρο με M ισαπέχοντες κόμβους. Κάθε κόμβος αντιπροσωπεύει μια εικόνα (image) (Ren 2014) του συστήματος (φ_i, i = 1,2,…,M), όπου κάθε εικόνα είναι μια χωρική κατανομή του φ και δεν αντιστοιχεί απαραίτητα σε κατάσταση διαβροχής, εκτός εάν η εικόνα βρίσκεται σε ελάχιστο (ευσταθής κατάσταση διαβροχής) ή σάγμα (ασταθής κατάσταση διαβροχής) ενέργειας. Εφαρμόζοντας την κάθετη συνιστώσα της γενικευμένης δύναμης, $\left(\nabla^2 G\right)^{\perp}(\gamma)$, σε κάθε εικόνα, η γ συγκλίνει στο MEP όπου εξ' ορισμού

$\left(\nabla^2 G\right)^{\perp}(\gamma)=0$. Ο υπολογισμός της κάθετης συνιστώσας απαιτεί την προβολή της $\nabla^2 G$ στο μοναδιαίο εφαπτόμενο διάνυσμα της γ και έχει ως αποτέλεσμα σημαντικό επιπρόσθετο υπολογιστικό κόστος. Εναλλακτικά, η απλουστευμένη μέθοδος χορδής (simplified string method) (E et al. 2007), εφαρμόζει τη δύναμη $\nabla^2 G$ και έπειτα ανακατανέμει τις εικόνες σε μεταξύ τους ίσες αποστάσεις. Η χρονική εξέλιξη κάθε εικόνας πραγματοποιείται με την επιβολή της γενικευμένης δύναμης $\nabla^2 G$, σύμφωνα με την (7), επαυξημένη με μια γενικευμένη δύναμη ανάλογη της καμπυλότητας της γ:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t}=\nabla^2\left[G_i+D_s\left(2\varphi_i-\varphi_{i-1}-\varphi_{i+1}\right)\right], i=2,\ldots,M-1, \qquad (9)$$

όπου D_s ο συντελεστής καμπυλότητας. Ο όρος της καμπυλότητας προστίθεται προς αποφυγή αναδίπλωσης της γ, που συνήθως έχει ως αποτέλεσμα την αποσταθεροποίηση του αριθμητικού σχήματος.
Η χρονική διακριτοποίηση της (9) γίνεται με παρόμοιο τρόπο με αυτόν της (7):

$$\begin{aligned}&\varphi_i^{(n+1)}+\Delta\tau\nabla^2\left[-3\varphi_i^{(n+1)}+\varepsilon^2\nabla^2\varphi_i^{(n+1)}-2D_s\varphi_i^{(n+1)}\right]=\\&\varphi_i^{(n)}+\Delta\tau\nabla^2\left[-4\varphi_i^{(n)}+\left(\varphi_i^{(n)}\right)^3+\frac{(1-a)}{2}5\left(\varphi_i^{(n)}-\varphi_s'\right)-D_s\left(\varphi_{i-1}^{(n)}+\varphi_{i+1}^{(n)}\right)\right],\end{aligned} \qquad (10)$$

όπου οι συντελεστές c_1 και c_2 και k_s έχουν αντικατασταθεί με τις επιλεγμένες τιμές 4, 0, 5, αντίστοιχα. Το υπολογιστικό χωρίο, Ω, διακριτοποιείται με ομοιόμορφα κατανεμημμένο πλέγμα ορθογώνιων στοιχείων με N κόμβους. Έτσι κάθε διακριτοποιημένη εικόνα του συστήματος έχει N DOFs $(\varphi_i(\mathbf{x}_j), i=1,2,\ldots,M, j=1,2,\ldots,N)$, όπου $\mathbf{x}$ οι συντεταγμένες των κόμβων. Η φ μετασχηματίζεται στο χώρο των συχνοτήτων με τη χρήση FFT: $\varphi_i(\mathbf{x}_j)\to\overline{\varphi_i}(\mathbf{k}_j)$, όπου $\mathbf{k}$ ο κυματαριθμός του μετασχηματισμού Fourier. Ο τελεστής ∇ μετασχηματίζεται σε έναν απλό πολλαπλασιαστή, $i\mathbf{k}$, και συνεπαγόμενα: $\nabla^2\to -k^2, \nabla^4\to k^4, k=|\mathbf{k}|$. Η μετασχηματισμένη (10) διατυπώνεται ως:

$$\begin{aligned}&\left(1+3\Delta\tau k^2+\Delta\tau k^4\varepsilon^2+2\Delta\tau k^2 D_s\right)\overline{\varphi_i^{(n+1)}}=\\&\left(1+4\Delta\tau k^2\right)\overline{\varphi_i^{(n)}}-\Delta\tau k^2\overline{\left(\varphi_i^{(n)}\right)^3}-\frac{5}{2}\Delta\tau k^2\overline{(1-a)\left(\varphi_i^{(n)}-\varphi_s'\right)}+\Delta\tau k^2 D_s\left(\overline{\varphi_{i-1}^{(n)}}-\overline{\varphi_{i+1}^{(n)}}\right).\end{aligned} \qquad (11)$$

Η (11) αποτελεί το βασικό υπολογιστικό πυρήνα της προτεινόμενης μεθόδου και συνοδεύεται από τις παρακάτω πράξεις ανά χρονικό βήμα (n) και ανά εικόνα (i):

α) Τους FFTs, $\varphi_i^{(n)}\to\overline{\varphi_i^{(n)}}$, $\left(\varphi_i^{(n)}\right)^3\to\overline{\left(\varphi_i^{(n)}\right)^3}$, $(1-a)\left(\varphi_i^{(n)}-\varphi_s'\right)\to\overline{(1-a)\left(\varphi_i^{(n)}-\varphi_s'\right)}$, $\varphi_{i-1}^{(n)}\to\overline{\varphi_{i-1}^{(n)}}$, $\varphi_{i+1}^{(n)}\to\overline{\varphi_{i+1}^{(n)}}$,

β) την επίλυση της (11),

γ) τον αντίστροφο FFT, $\overline{\varphi_i^{(n+1)}}\to\varphi_i^{(n+1)}$,

δ) τον υπολογισμό της απόστασης $d_i^{(n+1)}=\left\|\varphi_{i+1}^{(n+1)}-\varphi_i^{(n+1)}\right\|_2$ και την ανακατανομή των $\varphi_i^{(n+1)}$ στην καμπύλη $\gamma^{(n+1)}$ με γραμμική παρεμβολή, επιβάλοντας τον περιορισμό ίσων αποστάσεων διαδοχικών εικόνων (Backofen and Voigt 2010).

Η υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου καθορίζεται από την πολυπλοκότητα των FFTs που είναι σχεδόν γραμμική, $O(N\log N)$. Ενδεικτικά αναφέρεται ότι η εκτέλεση 1000 χρονικών βηματισμών σε GPU Tesla M2050, ενός συστήματος με 1,048,576 DOFs, διαρκεί μόλις ~3 s. Χρησιμοποιήθηκαν 40 κόμβοι για την αναπαράσταση του MEP, δίνοντας στο σύνολο 41,943,040 (40×1,048,576) DOFs.

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στο Σχ. 3 φαίνεται το MEP της μετάβασης σταγόνας σε συστοιχία αυλακιών ορθογωνικής διατομής από την κατάσταση CB στη W: Η σταγόνα ξεκινά από την κατάσταση CB (κατάσταση 1) και εισχωρεί σταδιακά στα υποκείμενα αυλάκια. Οι καταστάσεις 2-4-6-8 είναι ενδιάμεσες ευσταθείς καταστάσεις μερικής διαβροχής που περιέρχεται το σύστημα κατά τη μετάβαση από την 1 στην 9. Τα ενδιάμεσα ενεργειακά φράγματα ορίζονται κατά σειρά εμφάνισης ως: E_2-E_1, E_4-E_3, E_6-E_5, E_8-E_7 και η συνολικά απαιτούμενη ελάχιστη ενέργεια της μετάβασης 1→9 μπορεί να προσεγγιστεί ως το άθροισμα των ενεργειακών φραγμάτων – υποθέτοντας ότι κατά την κάθοδο από τα σάγματα (2-4-6-8), στο σύστημα δεν επιδρούν δυνάμεις αδράνειας (π.χ. παχύρευστη σταγόνα).

Το MEP της οριζόντιας μετατόπισης της σταγόνας φαίνεται στο Σχ. 4, όπου η σταγόνα μετατοπίζεται κατά ένα αυλάκι αποκολλώντας αρχικά από την ανάντη προεξοχή και μετέπειτα προσκολλώντας στη κατάντη προεξοχή. Το σύστημα κατά τη μετάβαση περιέρχεται σε μία ενδιάμεση ευσταθή κατάσταση διαβροχής, όπου η σταγόνα επικάθεται σε 4 προεξοχές (Σχ. 4 – κατάσταση 3), αντί για 5 όπως η αρχική κατάσταση διαβροχής. Το ενεργειακό φράγμα για κάθε μεταπήδηση αυλακιού υπολογίζεται ως το άθροισμα των επιμέρους ενεργειακών φραγμάτων E_2-E_1 και E_4-E_3, εφόσον δεν επιδρούν δυνάμεις αδράνειας.

4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η προτεινόμενη μέθοδος συνδυάζει τον υπολογισμό MEP μέσω της απλοποιημένης μεθόδου χορδής με τη διατύπωση Cahn-Hilliard μιας τροποποιημένης μεθόδου phase-field. Η ειδική διακριτοποίηση των εξισώσεων επιτρέπει την ταχεία επίλυση στο χώρο των συχνοτήτων με τη χρήση FFT σε κάρτες γραφικών.

Τα ενεργειακά φράγματα μεταβάσεων καταστάσεων διαβροχής εξάγονται από το υπολογισμένο MEP και αποτελούν ένα χρήσιμο μέτρο της απόδοσης των υπερυδρόφοβων επιφανειών. Ο συνδυασμένος υπολογισμός των ενεργειακών φραγμάτων CB-W και οριζόντιας μετατόπισης παρέχουν μια πλήρη εικόνα της συμπεριφοράς σταγόνων πάνω σε υπερυδρόφοβες επιφάνειες όσον αφορά την αντίστασή τους στην πάκτωση και την ευκινησία σταγόνων, αντίστοιχα.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα έρευνα έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο – ΕΚΤ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ) – Ερευνητικό Χρηματοδοτούμενο Έργο: ΘΑΛΗΣ (DESIREDROP: DESIgn and fabrication of Robust supEr hyDROPhobic/hydrophilic surfaces and their application in the realization of “smart” microfluidic valves).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Backofen R. and Voigt A. (2010), .A phase-field-crystal approach to critical nuclei., Journal of Physics-Condensed Matter 22(36), p.364104.

E W., Ren W. Q. and Vanden-Eijnden E. (2002), .String method for the study of rare events., Physical Review B 66(5), p.052301.

E W., Ren W. and Vanden-Eijnden E. (2007), .Simplified and improved string method for computing the minimum energy paths in barrier-crossing events., Journal of Chemical Physics, 126(16), p.164103.

Ellinas K., Tserepi A. and Gogolides E. (2011), .From Superamphiphobic to Amphiphilic Polymeric Surfaces with Ordered Hierarchical Roughness Fabricated with Colloidal Lithography and Plasma Nanotexturing., Langmuir 27(7), p.3960.

Ellinas K., Tserepi A. and Gogolides E. (2014), .Superhydrophobic, passive microvalves with controllable opening threshold: exploiting plasma nanotextured microfluidics for a programmable flow switchboard., Microfluidics and Nanofluidics 17(3), p.489.

Henkelman G. and Jonsson H. (2000), .Improved tangent estimate in the nudged elastic band method for finding minimum energy paths and saddle points., Journal of Chemical Physics 113(22), p.9978.

Henkelman G., Uberuaga B. P. and Jonsson H. (2000), .A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths., Journal of Chemical Physics 113(22), p.9901.

Khatavkar V. V., Anderson P. D. and Meijer H. E. H. (2007), .Capillary spreading of a droplet in the partially wetting regime using a diffuse-interface model., Journal of Fluid Mechanics 572, p.367.

Pashos G., Kokkoris G. and Boudouvis A. G. (2014), .A modified phase-field method for the investigation of wetting transitions of droplets on patterned surfaces., (submitted for publication).

Ren W. (2014), .Wetting Transition on Patterned Surfaces: Transition States and Energy Barriers., Langmuir 30(10), p.2879.

Verho T., Korhonen J. T., Sainiemi L., Jokinen V., Bower C., Franze K., Franssila S., Andrew P., Ikkala O. and Ras R. H. A. (2012), .Reversible switching between superhydrophobic states on a hierarchically structured surface., Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 109(26), p.10210.

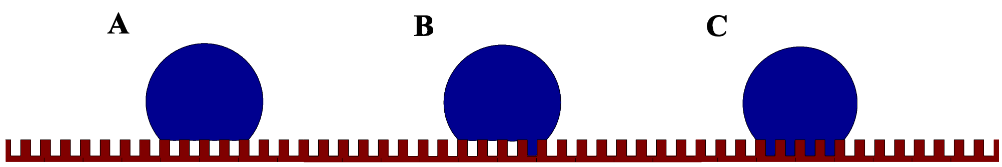
Vollmayr-Lee B. P. and Rutenberg A. D. (2003), .Fast and accurate coarsening simulation with an unconditionally stable time step., Physical Review E 68(6), p.066703.

Yue P. and Renardy Y. (2013), .Spontaneous penetration of a non-wetting drop into an exposed pore., Physics of Fluids 25(5), p.052104.

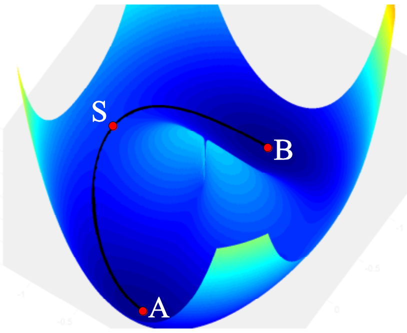
Yue P. T., Feng J. J., Liu C. and Shen J. (2004), .A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids., Journal of Fluid Mechanics 515, p.293.

Fast computations of wetting states of droplets on superhydrophobic patterned surfaces

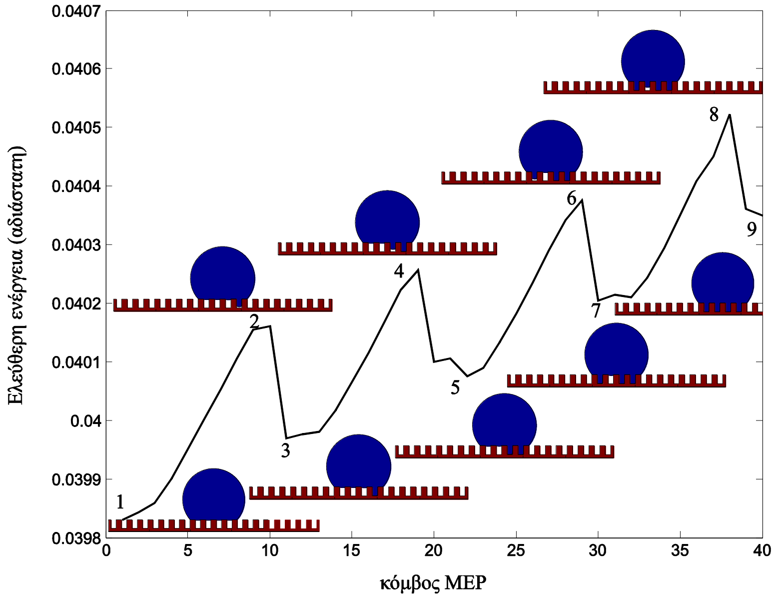
A method that computes minimum energy paths (MEPs) of wetting transitions is developed. The method couples the Cahn-Hilliard formulation of a modified phase-field method with the simplified string method. The effectiveness of the proposed method is demonstrated on two types of wetting transitions of droplets on rectangular grooved surfaces. The first is the transition from the apparently hydrophobic Cassie-Baxter wetting state to the apparently hydrophilic Wenzel state, where it is shown that the transition to the Wenzel state is sequential with the droplet wetting each groove successively. The second transition type is a lateral displacement of the droplet against the grooves, where the droplet successively detaches from the rear and attaches to the front protrusion of the surface. The energy barriers of both the transitions are extracted from the MEP; they are useful for the evaluation of the robustness of superhydrophobic surfaces (resistance to the Cassie-Baxter to Wenzel transition) and the droplet mobility on those surfaces (high mobility – small resistance to lateral displacements).



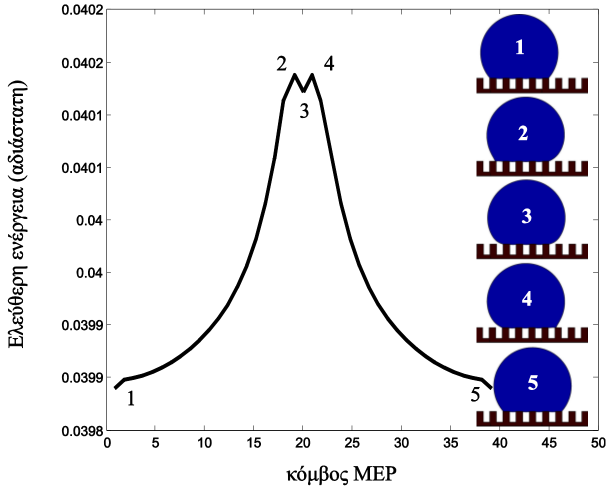
Σχ. 1. Διάφορες καταστάσεις ισορροπίας σταγόνας πάνω σε επιφάνεια με μορφολογία. A) επικαθήμενη σταγόνα (κατάσταση Cassie-Baxter), B) εισχώρηση σε ένα αυλάκι και C) πλήρης διαβροχή (κατάσταση Wenzel).



Σχ. 2. Διάγραμμα απεικόνισης της ενέργειας συστήματος 2 βαθμών ελευθερίας. Το MEP παρουσιάζεται με μαύρη γραμμή και συνδέει τις καταστάσεις ισορροπίας A και B μέσω του σάγματος S.



Σχ. 3. Ελεύθερη ενέργεια του CB-W MEP σταγόνας πάνω σε επιφάνεια με αυλάκια. Οι καταστάσεις ισορροπίας 1-3-5-7-9 και 2-4-6-8 είναι ευσταθείς (ενεργειακά ελάχιστα) και ασταθείς (ενεργειακά σάγματα), αντίστοιχα.



Σχ. 4. Ελεύθερη ενέργεια του MEP οριζόντιας μετατόπισης σταγόνας πάνω σε επιφάνεια με αυλάκια. Οι καταστάσεις ισορροπίας 1-3-5 και 2-4 είναι ευσταθείς (ενεργειακά ελάχιστα) και ασταθείς (ενεργειακά σάγματα), αντίστοιχα.

ΜΗ-ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΕΞΕΛΙΞΗ ΤΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟ-ΥΔΡΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΑΣΤΑΘΕΙΑΣ ΝΕΥΤΩΝΙΚΟΥ Η ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΟΥ ΥΜΕΝΑ ΥΠΟ ΠΕΡΙΟΔΙΚΟ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΠΕΔΙΟ

Γεώργιος Καραπέτσας[1] & Βασίλης Μποντόζογλου[2]
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 38334 Βόλος
[1]gkarapetsas@gmail.com
[2]bont@mie.uth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στη παρούσα εργασία μελετάται υπολογιστικά η μη-γραμμική δυναμική της διεπιφάνειας μεταξύ ενός ιξωδο-ελαστικού και ενός νευτωνικού ρευστού που είναι εκτεθειμένα σε περιοδικό ηλεκτρικό πεδίο. Η υπολογιστική προσομοίωση γίνεται με επίλυση με τη μέθοδο Galerkin πεπερασμένων στοιχείων των εξισώσεων διατήρησης μάζας και ορμής και της εξίσωσης Laplace για το ηλεκτρικό δυναμικό. Οι παραπάνω εξισώσεις επιλύονται σε συνδυασμό με τις εξίσωσεις του πλέγματος για την παρακολούθηση του χρονομεταβαλλόμενο φυσικού πεδίου και πραγματοποιούμε προσομοιώσεις λαβάνοντας πλήρως υπόψη τη ροή και την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου σε όλες τις φάσεις. Η ιξωδοελαστική συμπεριφορά του πολυμερικού υλικού μοντελοποιείται χρησιμοποιώντας το καταστικό μοντέλο Phan-Thien and Tanner (PTT). Πραγματοποιήθηκε μια πλήρης παραμετρική μελέτη για την επίδραση των ηλεκτρικών ιδιοτήτων των ρευστών, της εφαρμοζόμενης τάσης καθώς και των διαφόρων ρεολογικών ιδιοτήτων του πολυμερικού υμένα.

Λέξεις Κλειδιά: ηλεκτρο-υδροδυναμική αστάθεια, ιξωδοελαστικό ρευστό, ηλεκτρικό πεδίο

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

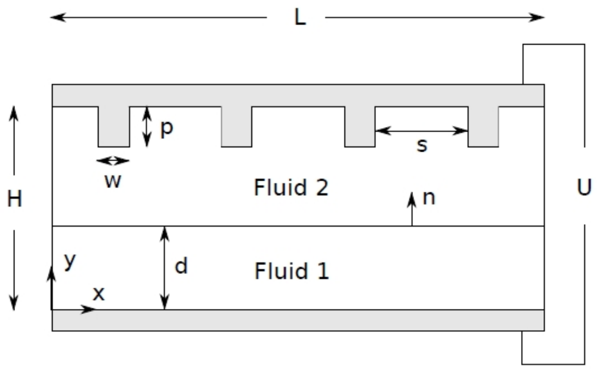
Εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο με διεύθυνση κάθετη στην επίπεδη διεπιφάνεια δύο ρευστών είναι γνωστό ότι προκαλεί μία αστάθεια γνωστή ως ηλεκτρο-υδροδυναμική. Το νεώτερο ενδιαφέρον στο φαινόμενο οφείλεται στην δυνατότητα χρήσης της αστάθειας σε μικρο-κλίματα και νανο-κλίμακα για τη δημιουργία πολύ κανονικών δομών με αρκετές εφαρμογές στη βιομηχανία. Όπως είναι αναμένομενο η διέργασία αυτή έχει τραβήξει το ενδιαφέρον αρκετών ερευνητικών ομάδων τόσο σε πειραματικό (Schäffer et al. 2000, 2001, Lin et al. 2001, 2002) όσο και σε θεωρητικό επίπεδο (Pease & Russel 2002, Shankar & Sharma 2004, Craster & Matar 2005, Wu et al. 2005, Roberts & Kumar 2009, Espin et al. 2013).

Η διάταξη που έχει μελετηθεί περισσότερο αφορά επίπεδα ηλεκτρόδια που περιέχουν μεταξύ τους δύο νευτωνικά ρευστά, ώστόσο είναι γνωστό από τη βιβλιογραφία ότι η χρήση, στη θέση του επίπεδου, ενός περιοδικά διαμορφωμένου ηλεκτροδίου παρέχει καταρχήν την δυνατότητα για μείωση των διαστάσεων έως την νάνο-κλίμακα. Η περίπτωση αυτή έχει μελετηθεί λιγότερο και έχει ως ιδιαιτερότητα την μη-ύπαρξη βασικής κατάστασης ισορροπίας επειδή το ηλεκτρικό πεδίο δεν είναι ομοιόμορφο αλλά περιοδικό (Heier et al 2009).

Η διεπιφανειακή αστάθεια ενός Νευτωνικού υμένα έχει μελετηθεί αρκετά στη βιβλιοραφία και οι περισσότερες παράμετροι που την επηρεάζουν είναι πλέον κατανοητά. Το ίδιο όμως δεν συμβαίνει για την περίπτωση υγρών με περίπλοκη ρεολογική συμπεριφορά τα οποία έχουν λάβει πολύ μικρότερη προσοχή στη βιβλιογραφία. Ωστόσο πρέπει να αναφερθεί ότι οι πιθανότερες εφαρμογές αφορούν πολυμερικούς υμένες οι οποίοι παραμορφώνονται και στη συνέχεια ψύχονται για την διατήρηση της μικροδομής. Οι πολυμερικοί υμένες στις περισσότερες περιπτώσεις παρουσιάζουν ιξωδοελαστική συμπεριφορά. Στην περίπτωση επίπεδων ηλεκτροδίων έχουν γίνει προσπάθειες για τη μελέτη της επίδρασης της ιξωδοελαστικότητας κάνοντας χρήση του καταστατικού μοντέλου Oldroyd-B και πραγματοποιώντας γραμμική ανάλυση ευστάθεια στο όριο πολύ μικρών διαταραχών από τη βασική κατάσταση ισορροπίας (Wu & Chou 2005, Tomar et al. 2007, Espin et al. 2013). Οι μελέτες αυτές κατέδειξαν ότι στην περίπτωση επίπεδων ηλεκτροδίων οι ρεολογικές ιδιότητες του υλικού επηρεάζουν μεν τον ρυθμό αύξησης της διαταραχής αλλά αφήνουν ανεπηρέαστο το μήκος κύματος της διαταραχής. Στην περίπτωση των επίπεδων ηλεκτροδίων η βασική κατάσταση ισορροπίας είναι ενα στατικό φίλμ, ωστόσο στην περίπτωση διαμορφωμένων ηλεκτροδίων η μη ύπαρξη βασικής κατάστασης ισορροπίας καθιστά απαραίτητη τη διενέργεια χρονομεταβαλλόμενων προσομοιώσεων για τη μελέτη της ευστάθειας του συστήματος.

Οι χρονομεταβαλλόμενες προσομοιώσεις επιπλέον επιτρέπουν τη μελέτη της συμπεριφοράς του υλικού στη μη γραμμική περιοχή και έχουν πραγματοποιηθεί στο παρελθόν για την περιπτωση Νευτωνικών ρευστών κάνοντας χρήση κυρίως τη θεωρία λίπανσης (Craster & Matar 2005, Bandyopahyay et al 2012) αποκαλύπτοντας την επίδραση του αρχικού πάχους του ύμενα καθώς και την επίδραση της γεωμετρίας ενός διαμορφωμένου ηλεκτροδίου στην τελική παραμόρφωση της διεπιφάνειας. Είναι χρήσιμο ωστόσο να σημειωθεί ότι οι Pease & Russel (2003, 2004) υποστήριξαν ότι στις περισσότερες περιπτώσεις των πειραμάτων που έχουν διεξαχθεί στη βιβλιογραφία η θεωρία λίπανσης δεν είναι σε ισχύ και έδειξαν ότι μοντέλα με πιο γενική ισχύ δίνουν πιο πιστά αποτελέσματα. Από την άλλη, είναι επίσης γνωστό ότι στην περίπτωση των ιξωδοελαστικών υλικών είναι γνωστό ότι η θεωρία της λίπανσης μπορεί να οδηγήσει σε σημαντική υποεκτίμηση των κάθετων τάσεων.

Ο σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η διερεύνηση της μη-γραμμικής εξέλιξης της ροής ενός ιξωδοελαστικού υμένα υπό την επίδραση ενός ετερογενούς ηλεκτρικού πεδίου, λαμβάνοντας πλήρως υπόψη την επίδρασης της ελαστικότητας του υλικού. Αποφεύγουμε να κάνουμε οποιαδήποτε παραδοχή, όπως π.χ. χρήση της θεωρίας λίπανσης, προκειμένου να περιγράψουμε τη ροή με όσο το δυνατό μεγαλύτερη ακρίβεια. Πραγματοποιούμε διδιάστατες χρονομεταβαλλόμενες προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων σε συνδυασμό με τη χρήση ενός ελλιπτικού σχήματος δημιουργίας πλέγματος για τον προσδιορισμό της θέσης της διεπιφάνειας. Η ιξωδοελαστικές ιδότητες του υλικού μοντελοποιούνται με το καταστατικό μοντέλο Phan-Thien Tanner και πραγματοποιούμε μια πλήρη παραμετρική ανάλυση των διαφόρων γεωμετρικών και ρεολογικών παραμέτρων για τη διερεύνηση των ελάχιστων κατασκευαστικών ορίων της διεργασίας.



Σχήμα 1. Η διάταξη ηλεκτροδίων και ρευστών που μελετάται.

2. ΚΑΤΑΣΤΡΩΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

Θεωρούμε τη ροή δύο διηλεκτρικών ρευστών που περικλείονται μεταξύ δύο ηλεκτροδιών. Τα ηλεκτρόδια μπορεί να είναι είτε επίπεδα είτε διαμορφωμένα με περιοδική δομή όπως φαίνεται στο σχήμα 1. Το ρευστό 1 είναι ιξωδοελαστικό και περιβάλλεται από ένα Νευτωνικό ρευστό (ρευστό 2). Αρχικά τα δύο ρευστά είναι ακίνητα και η μεταξύ τους διεπιφάνεια είναι επίπεδη. Τα ρευστά είναι ασυμπίεστα με σταθερή πύκνότητα, ρ_i, διηλεκτρική σταθερά, ε_i, $i=1,2$. Το πολυμερικό φιλμ έχει χρόνο χαλάρωσης λ και ένα ολικό δυναμικό ιξώδες $\mu_1 = \mu_s + \mu_p$, όπου μ_s και μ_p το Νευτωνικό και το πολυμερικό μέρος, αντίστοιχα, ενώ το ρευστό 2 έχει σταθερό ιξώδες, μ_2. Η επιφανειακή τάση της διεπιφάνειας υγρού-υγρού είναι σταθερή και συμβολίζεται με γ. Μεταξύ των δύο ηλεκτροδίων θεωρούμε σταθερό δυναμικό U.

Αδιαστατοποιούμε τις μεταβλητές x και y με τη μέγιστη απόσταση μεταξύ των δύο ηλεκτροδίων, H, την ταχύτητα $\underline{v}$ με την χαρακτηριστική ταχύτητα $V = \dfrac{\varepsilon_o U^2}{\mu_1 H}$, την πίεση και τις τάσεις με $\dfrac{\mu_1 V}{H}$ και το ηλεκτρικό δυναμικό με τη διαφορά δυναμικού U. Μετά από την αδιαστατοποίηση προκύπτουν οι παρακάτω αδιάστατοι αριθμοί:

Ο αριθμός Reynolds $\mathrm{Re} = \dfrac{\rho_1 V H}{\mu_1}$, ο αριθμός Weissenberg $Wi = \dfrac{\lambda V}{H}$, ο τριχοειδής αριθμός $Ca = \dfrac{\mu_1 V}{\gamma}$, ο λόγος του Νευτωνικού ιξώδους ως προς το συνολικό $\beta = \dfrac{\mu_s}{\mu_1}$, καθώς και οι αδιάστατοι λόγοι πυκνοτήτων, $D_i = \dfrac{\rho_i}{\rho_1}$, και ιξωδών, $M_i = \dfrac{\mu_i}{\mu_1}$, $i=1,2$. μήκη και $\varepsilon_2 = \dfrac{L_2}{R}$. Οι αδιάστατες εξισώσεις που προκύπτουν τελικά από τις εξισώσεις ορμής και συνέχειας για μόνιμη κατάσταση είναι:

$$D_i \,\mathrm{Re}\left(\frac{\partial \underline{v}_i}{\partial t} + \underline{v}_i \cdot \underline{\nabla}\underline{v}_i\right) - \underline{\nabla}\cdot \underline{\underline{\sigma}}_i = 0 \tag{1}$$

$$\underline{\nabla}\cdot \underline{v}_i = 0 \tag{2}$$

όπου $\underline{\underline{\sigma}}_i = -P_i \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}_i + \underline{\underline{m}}_i$ συνολικός τανυστής των τάσεων, P_i η πίεση και $\underline{\underline{\tau}}_i$ ο επιπλέον τανυστής των τάσεων

$$\underline{\underline{\tau}}_1 = \underline{\underline{\tau}}_p + 2\beta M_1 \underline{\underline{\dot{\gamma}}}_1 \tag{3}$$

$$\underline{\underline{\tau}}_2 = 2M_2 \underline{\underline{\gamma}}_2 \tag{4}$$

Για το πολυμερικό υλικό ο επιπλέον τανυστής των τάσεων χωρίζεται σε ένα πολυμερικό $\underline{\underline{\tau}}_p$ και σε ένα ιξώδες μέρος $2\beta M_1 \underline{\underline{\dot{\gamma}}}_1$, όπου $\underline{\underline{\dot{\gamma}}}_i = \frac{1}{2}(\underline{\nabla}\underline{v}_i + \underline{\nabla}\underline{v}_i^{\,T})$ ο ρυθμός παραμόρφωσης. Ο τανυστής τασεων Maxwell, $\underline{\underline{m}}_i$, περιγράφει την αλληλεπίδραση του ρευστού i με το ηλεκτικό πεδίο και ορίζεται ως εξής

$$\underline{\underline{m}}_i = \varepsilon_i \underline{E}_i \underline{E}_i - \frac{1}{2}\varepsilon_i \underline{E}_i \cdot \underline{E}_i I \tag{5}$$

Οι τάσεις Maxwell εξαρτώνται από την τοπική ένταση του ηλεκτρικού πεδίου που δίνεται από την επίλυση των εξισώσεων Maxwell

$$\nabla \cdot \left(\varepsilon_i \underline{\underline{E}}_i\right) = 0 \tag{6}$$

$$\nabla \times \underline{\underline{E}}_i = 0 \tag{7}$$

Ορίζοντας ένα δυναμικό φ_i τέτοιο ώστε $\underline{\underline{E}}_i = -\nabla\varphi_i$ οι εξισώσεις (6) και (7) μπορούν να συνδυαστούν στην παρακάτω εξίσωση για το δυναμικό

$$\nabla \cdot \left(\varepsilon_i \nabla \varphi_i\right) = 0 \,. \tag{8}$$

Προκειμένου να υπολογιστεί το πολυμερικό μέρος του τανυστή των τάσεων είναι απαραίτητο να χρησιμοποιήσουμε κάποια καταστατική εξίσωση. Λόγω των καλών της ρεολογικών προβλέψεων και της ευχρηστίας της, επιλέξαμε την παρακάτω καταστατική η οποία έχει προταθεί από τους Phan-Thien & Tanner (1977):

$$Y\left(tr\underline{\underline{\tau}}_p\right)\underline{\underline{\tau}}_p + Wi\overset{\lozenge}{\underline{\underline{\tau}}}_p - 2(1-\beta)M_1\dot{\underline{\underline{\gamma}}}_1 = 0\text{, όπου } Y\left(tr\underline{\underline{\tau}}_p\right) = \exp\left[\frac{a_{PTT}}{1-\beta}Wi\,tr\underline{\underline{\tau}}_p\right] \tag{9}$$

και $tr\underline{\underline{\tau}}_p$ το ίχνος του τανυστή $\underline{\underline{\tau}}_p$. Το σύμβολο $\lozenge$ πάνω από τον τανυστή των τάσεων $\underline{\underline{\tau}}_p$ δηλώνει την χρονοπαράγωγο Gordon-Schowalter που ορίζεται ως εξής:

$$\overset{\lozenge}{\underline{\underline{\tau}}}_p = \frac{D\underline{\underline{\tau}}_p}{Dt} - \left(\underline{\nabla}\underline{v}_1 - \xi_s\dot{\underline{\underline{\gamma}}}_1\right)^T \cdot \underline{\underline{\tau}}_p - \underline{\underline{\tau}}_p \cdot \left(\underline{\nabla}\underline{v}_1 - \xi_s\dot{\underline{\underline{\gamma}}}_1\right) \tag{10}$$

όπου η παράμετρος ξ_s δηλώνει την ολίσθηση μεταξύ του μοριακού δικτύου και του συνεχούς μέσου. Επιπλέον χρησιμοποιήθηκε η τεχνική EVSS-G η οποία συνίσταται στο χωρισμό του πολυμερικού μέρους των τάσεων σε ένα ελαστικό κι ένα ιξώδες μέρος

$$\underline{\underline{\tau}}_p = \underline{\underline{\Sigma}} + 2(1-\beta)M_1\dot{\underline{\underline{\gamma}}}_1 . \tag{11}$$

Επιβάλουμε συνθήκες μη ολίσθησης και μη διαπεροτότητας στα τοιχώματα των ηλεκτροδίων ενώ στα άκρα του πεδίου επιβάλλουμε περιοδικές συνθήκες. Κατά μήκος της διεπιφάνειας η ταχύτητα είναι συνεχής

$$\underline{v}_1 = \underline{v}_2 \tag{12}$$

και το πεδίο ροής θα πρέπει να ικανοποιεί ένα ισοζύγιο δυνάμεων μεταξύ του συνολικού τανυστή των τάσεων στο ρευστό και την επιφανειακή τάση

$$\underline{n}\cdot\underline{\underline{\sigma}}_1 = \underline{n}\cdot\underline{\underline{\sigma}}_2 + \frac{2H}{Ca}\underline{n} \tag{13}$$

όπου $2H = -\underline{\nabla}_s \cdot \underline{n}$ και $\underline{\nabla}_s = (\underline{\underline{I}} - \underline{n}\underline{n})\cdot\underline{\nabla}$. Στην εξίσωση (13), H είναι η μέση καμπυλότητα της ελεύθερης επιφάνειας και $\underline{n}$ το μοναδιαίο προς τα έξω στραμμένο διάνυσμα.

Σε ότι αφορά το ηλεκτρικό πεδίο εφαρμόζουμε τις παρακάτω συνθήκες:

$$\varphi_1 = \varphi_2 , \tag{14}$$

$$\varepsilon_1\nabla\varphi_1 = \varepsilon_2\nabla\varphi_2 . \tag{15}$$

2.1 Δημιουργία πλέγματος

Για την επίλυση των παραπάνω εξισώσεων επιλέξαμε τη μέθοδο των μικτών πεπερασμένων στοιχείων μαζί με ένα σύστημα οιονεί ελλειπτικών μερικών διαφορικών εξισώσεων, ικανών να δημιουργήσουν ένα πλέγμα προσαρμοζόμενο στο χώρο που καταλαμβάνει το ρευστό. Η μέθοδος αυτή έχει εφαρμοστεί με επιτυχία στο παρελθόν για την προσομοίωση διάφορων προβλημάτων με ελεύθερες επιφάνειες (Tsiveriotis & Brown 1992, Christodoulou & Scriven 1992, Dimakopoulos & Tsamopoulos 2003). Το φυσικό πεδίο απεικονίζεται σε ένα υπολογιστικό με σταθερά σύνορα, με τον εξής μετασχηματισμό.

$$(\text{x, y}) \xrightarrow{J} (\eta, \xi) \tag{15}$$

Με αυτή την απεικόνιση, κάθε σημείο που έχει συντεταγμένες (r, z) , απεικονίζεται σε ένα σημείο στο υπολογιστικό πεδίο με συντεταγμένες (η, ξ). Τα δύο συστήματα συντεταγμένων συνδέονται μεταξύ τους μέσω του παρακάτω συστήματος μερικών διαφορικών εξισώσεων:

$$\underline{\nabla}\cdot\left(a\cdot\underline{\nabla}\eta\right) = 0 \tag{16}$$

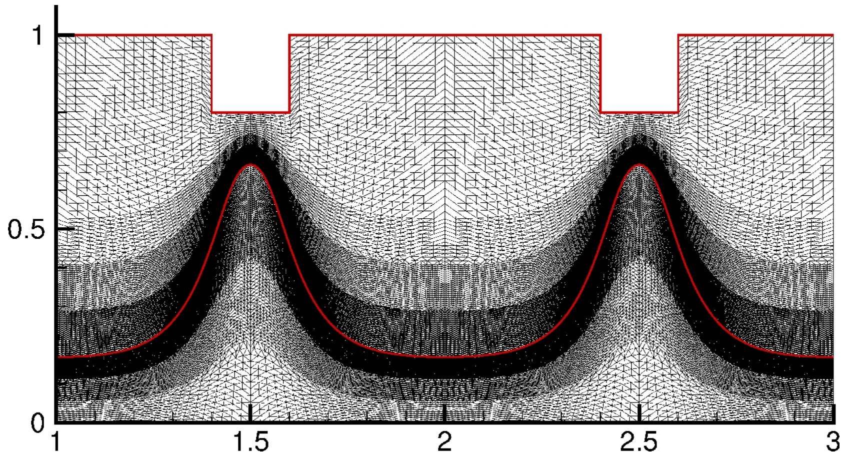
$$\underline{\nabla}\cdot\left(\varepsilon_1\sqrt{\frac{r_\xi^2+z_\xi^2}{r_\eta^2+z_\eta^2}} + \left(1-\varepsilon_1\right)\right)\underline{\nabla}\xi = 0 \tag{17}$$

$$a = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 100 \end{pmatrix} \tag{18}$$

όπου οι δείκτες δείχνουν παράγωγο ως προς την μεταβλητή και ε_1 είναι μια εμπειρική παράμετρος μεταξύ 0 και 1, που για την περίπτωση μας λήφθηκε ίση με 0.1. Προκειμένου να επιλύσουμε το παραπάνω σύστημα διαφορικών εξισώσεων πρέπει να επιβληθούν και κατάλληλες συνοριακές συνθήκες. Στα σταθερά σύνορα επιβάλουμε τις θέσεις τους ενώ οι υπόλοιποι βαθμοί ελευθερίας χρησιμοποιούνται για την επιβολή κατάλληλων συνθηκών κατανομής των κόμβων κατά μήκος όλων των συνόρων[6]. Επιπλέον επάνω στην ελεύθερη επιφάνεια επιβάλουμε την κινηματική εξίσωση

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \underline{v}_1 \cdot \nabla f = 0 \tag{19}$$

οπου η συνάρτηση f περιγράφει τη θέση της ελεύθερης επιφάνειας. Το παραπάνω σύστημα διαφορικών εξισώσεων επιλύεται με τροποποιημένη Newton-Raphson.

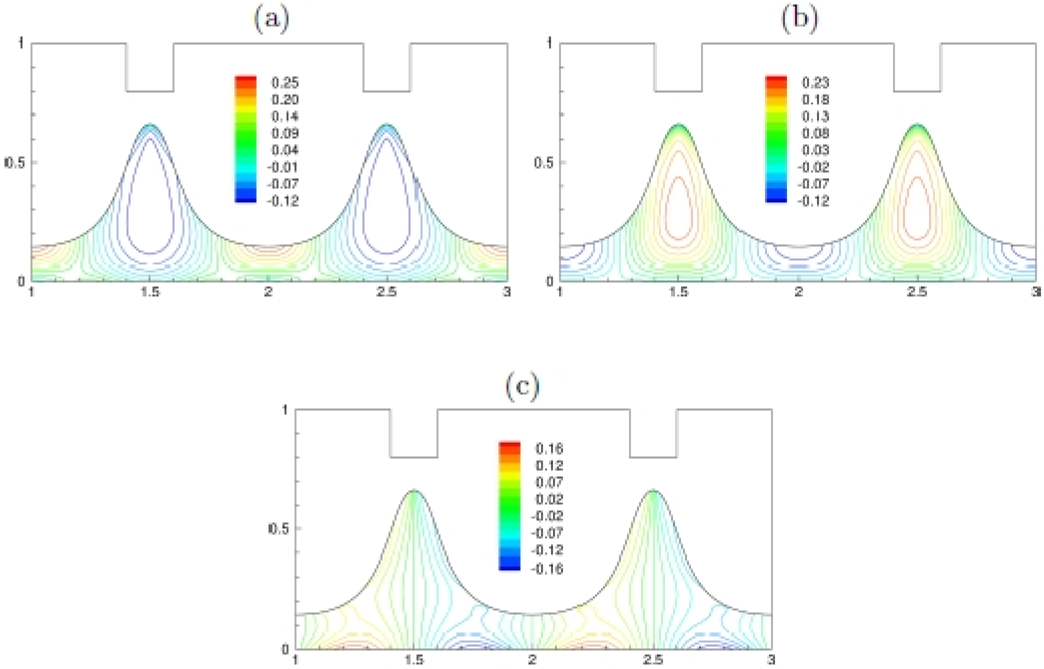


Σχήμα 2. Τυπικό πλέγμα με τρία επίπεδα πύκνωσης γύρω από τη διεπιφάνεια για *Wi*=0, *Ca*=30, *d*=0.3, *s*=0.8, *p*=0.2, *w*=0.2 at time t = 26.04. Για ευκρίνεια παρουσιάζεται μέρος του υπολογιστικού πεδίου, 1 < x < 3.

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

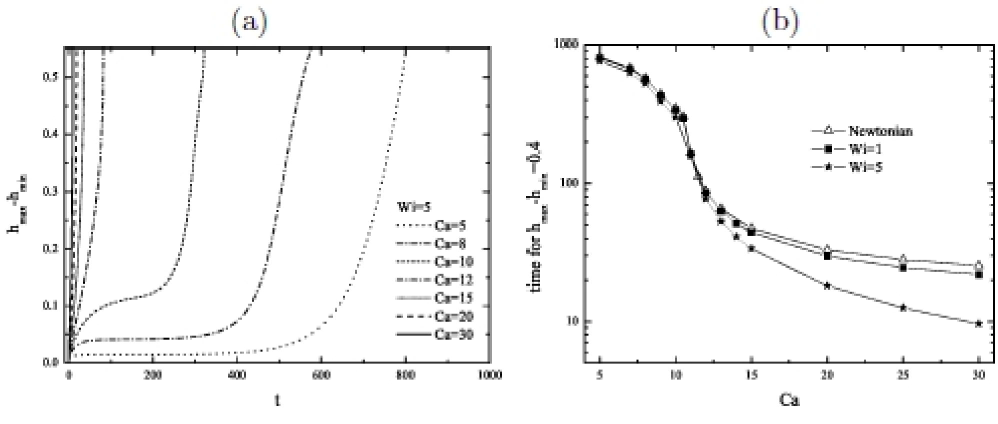
Όπως φαίνεται στο σχήμα 1 θεωρούμε ένα περιοδικά διαμορφωμένο ηλεκτρόδιο σαν μάσκα προκειμένου να προκαλέσουμε τη διαμόρφωση παρόποιων διατάξεων και στη διεπιφάνεια του υμένα. Για το σκοπό της εργασίας αυτής θεωρούμε ότι το πλάτος και ύψος των προεξοχών είναι *w*=0.2 και *p*=0.2, αντίστοιχα. Επιπλέον θεωρήσαμε συνθήκες έρπουσας ροής (*Re*=0.00001) και λόγους πυκνότητας και ιξωδών τυπικούς για ένα σύστημα υγρού-αέρα, $D_2 = 0.001$, $M_2 = 0.001$.

Στο σχήμα 3 παρουσιάζουμε τις ισοδυναμικές γραμμές του πολυμερικού μέρους των τάσεων για χρόνο $t = 28.44$, $Ca = 20$, $Wi = 2$, $d = 0.3$ και $s = 0.8$ (για την ευκρίνεια του σχηματος παρουσιάζουμε μέρους του υπολογιστικού μας πεδίου, $1 \leq x \leq 3$). Ο υγρός υμένας αρχικά είναι επίπεδος και δεν υπάρχει ροή. Εφαρμόζοντας τάση μεταξύ των δύο ηλεκτροδίων το υγρό δέχεται ανομοιόμορφες ηλεκτρικές δυνάμεις, λόγω της παρουσίας των προεξοχών και του συνεπαγόμενου ετερογενούς ηλεκτρικού πεδίου και ο υγρός υμένα προσελκύεται από το πάνω ηλεκτρόδιο προς τις προεξοχές αποσταθεροποιώντας τη διεπιφάνεια. Το ύψος των διαταραχών του υμένα αυξάνεται διαρκώς μέχρι να ακουμπήσει το πάνω ηλεκτρόδιο. Οι προσωμοιώσεις σταματήθηκαν όταν ο υμένας έφτασε σε μικρή απόσταση από το ηλεκτρόδιο. Το ροικό πεδίο φαίνεται να είναι συμμετρικό γύρω από τις προεξοχές ακολουθώντας τη δομή του πάνω ηλεκτροδίου. Όπως φαίνεται στο σχήμα οι τάσεις $\tau_{p,xx}$ και $\tau_{p,yy}$ αναπτύσσουν ένα συνοριακό στρώμα στη κορυφη της προεξοχής του υμένα, για την σωστή ανάλυση του οποίου απαιτήθηκε τοπική πύκνωση του πλέγματος κοντά στη διεπιφάνεια υγρού-αερα. Η xx πολυμερική τάση παίρνει αρνητικές τιμές κοντά στην κορυφή του υμένα και προκαλεί την συμπίεση στην x-κατεύθυνση της υπό δημιουργία κολώνας. Από την άλλη η εκτατική κάθετη τάση $\tau_{p,yy}$ παίρνει θετικές τιμές και φαίνεται να συνεισφέρει στην αποσταθεροποιηση της διεπιφάνειας. Μια πρώτη παρατήρηση είναι ότι οι κάθετες τάσεις κυριαρχούν καθώς οι διατμητική τάση $\tau_{p,xy}$ είναι σχεδόν 2 φορές μικρότερη. Στη βιβλιογραφία μια συνήθης υπόθεση για την εξαγωγή απλοποιημένων εξισώσεων είναι η θεώρια της λίπανσης σύμφωνα με την οποία οι κάθετες τάσεις είναι αμελητέες.



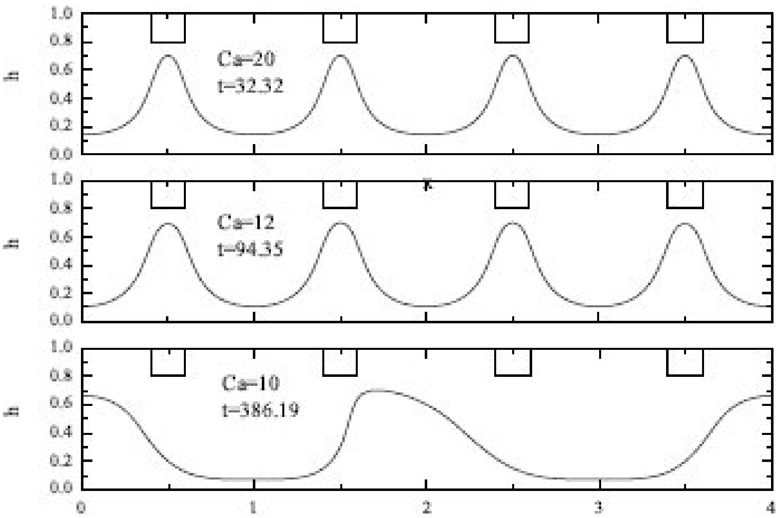
Σχήμα 3. Ισοδυναμικές γραμμές των πολυμερικών τάσεων (a) $\tau_{p,xx}$, (b) $\tau_{p,yy}$ και (c) $\tau_{p,xy}$ για t = 28.44 και Wi = 2, Ca = 20, β = 0, a_{PTT} = 0.05, ε_1 = 2.5, ε_2 = 1, d = 0.3, s = 0.8, p = 0.2, w = 0.2.

Στην περίπτωση μας είναι ξεκάθαρο πως κάτι τέτοιο δεν ισχύει. Παρατηρούμε επίσης ότι η διατμητική τάση τείνει να κρατήσει ο υμένας το αρχικό του σχήμα επιδρώντας σταθεροποιητικά στη ροή. Πρέπει να σημειωθεί ότι σύμφωνα με τους Wu & Chou (2005) οι οποίοι χρησιμοποιούν τη θεωρία της λίπανσης στην περίπτωση επίπεδων ηλεκτροδίων, η τάση $\tau_{p,xy}$ είναι η μόνη που επιβιώνει και σύμφωνα με τη γραμμική ανάλυση ευστάθειας που πραγματοποίησαν έχει αποσταθεροποιητικό χαρακτήρα. Από την ανάλυση των δικών μας αποτελεσμάτων προκύπτει ότι αυτό είναι πράγματι αλήθεια σε πολύ αρχικούς χρόνους, όπου η θεωρία της λίπανσης είναι και τυπικά σωστή, αλλά φαίνεται ότι η επίδραση της διατμητικής τάσης αλλάζει χαρακτήρα σε μεγαλύτερους χρόνους.



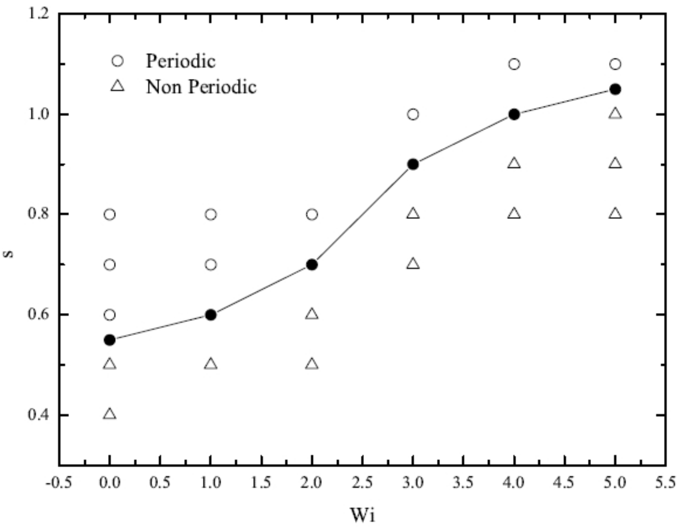
Σχήμα 4. (a) Χρονική εξέλιξη του πλάτους διαταραχών για διάφορους Ca και για Wi = 5. (b) Χρόνος που απαιτείται ώστε h_{max} -h_{min} = 0.4 συναρτήση του αριθμού Ca για διάφορους Wi. Οι υπόλοιπες παράμετροι είναι ίδιες με αυτές του σχήματος 1.

Πρόσφατα οι Heier et al. (2009) έδειξαν ότι με κατάλληλο χειρισμό της επίδρασης των τάσεων Maxwell και της διεπιφανειακής τάσης είναι δυνατό να επιτύχουμε μια μονιμη παραμόρφωση στη διεπιφάνεια χωρίς να έρθει σε επαφή ο υμένας με το πάνω ηλεκτρόδιο. Για να διερευνήσουμε την δυνατότητα αυτή, εξετάσαμε στο σχήμα 4a την επίδραση του αριθμού *Ca* στη χρονική εξέλιξη του μέγιστου πλάτους των διαταραχών της διεπιφάνειας. Διαπιστώνουμε ότι για χαμηλές τιμές του *Ca* το πλάτος της διαταραχής αρχικά μεγαλώνει και κατόπιν επέρχεται κορεσμός, υποδεικνύοντας ότι οι ηλεκτρικές δυνάμεις έρχονται σε ισορροπία με τις διεπιφανειακές δυνάμεις. Το πλάτος ισορροπίας αυξάνεται με το Ca και η μέγιστη τιμή είναι της τάξης του 10% της απόστασης των ηλεκτροδίων. Ωστόσο παρατηρούμε ότι για πολύ μεγάλους χρόνους οι καταστάσεις αυτές ισορροπίας δεν είναι ευσταθείς και κάποιες κορυφές του υμένα φθάνουν τελικά στο πάνω ηλεκτρόδιο. Με την αύξηση του αριθμού *Ca* η επίδραση της επιφανειακής τάσης γίνεται λιγότερο σημαντική και η αποσταθεροποίηση της διεπιφάνειας συμβαίνει νωρίτερα. Στο σχήμα 4b σχεδιάσαμε το χρόνο που απαιτείται ώστε το μέγιστο πλάτος της διαταραχης, h_{max} -h_{min} = 0.4 προκειμένου να εκτιμήσουμε το όριακο *Ca* πέρα από τον οποίο η ψευδομόνιμη κατάσταση δεν είναι πλέον δυνατή. Βρέθηκε ότι για τις συγκεκριμένες παραμέτρους που μελέτησαμε ο οριακός $Ca \approx 10$. Παρατηρούμε ότι ο οριακός *Ca* που προκύπει από τις μη γραμμικές προσομοιώσεις είναι αρκετά μικρότερος από αυτό που προβλέπει η γραμμική θεωρία σύμφωνα των Heier et al. (2009) σύμφωνα με την οποίαν Ca_{cr} = 40.9. Μια επιπλέον παρατήρηση ότι ο χρόνος τον οποίο περνά το σύστημα στην ψευδομόνιμη κατάσταση δεν επηρεάζεται από την ελαστικότητα του υμένα και αυτό αντανακλάται στη στο γεγονός ότι ο οριακός *Ca* παραμένει σταθερός με την αύξηση του *Wi*. Η επίδραση της ελαστικότητας ωστόσο γίνεται εμφανής για μεγαλύτερες τιμές του *Ca* όπου η επίδραση της επιφανειακής τάσης είναι λιγότερο έντονη.



Σχήμα 5. Ύψος διεπιφάνειας για διάφορους *Ca* και *Wi*=1. Οι υπόλοιπες παράμετροι είναι ίδιες με αυτές του σχήματος 1.

Στο σχήμα 4 παρουσιάζουμε το σχήμα της διεπιφάνειας σε μεγάλους χρόνους για τρεις διαφορετικές τιμές του αριθμού *Ca*. Βλέπουμε ότι για τιμές μεγαλύτερες της οριακής τιμής η παραμόρφωση της διεπιφάνειας παραμένει περιοδική ακολουθώντας πιστά τη γεωμετρία του πάνω ηλεκτροδίου. Απο την άλλη παρατηρούμε ότι με τη μείωση του *Ca* η περιοδικότητα καταστρέφεται με αύξηση του μήκους κύματος της διαταραχής. Αυτό που συμβαίνει είναι ότι κάποιες κολόνες μεγαλώνουν σε βαρος των γειτόνων τους και αυτό είναι στην ουσία ένα φαινόμενο ωρίμανσης κατά Ostwald (Ostwald ripening).



Σχήμα 6. Χάρτης ροής για *Ca* = 20. Οι υπόλοιπες παράμετροι είναι ίδιες με αυτές του σχήματος 1.

Προκειμένου να είμαστε σε θέση να παράγουμε μίκροδομές ή νανοδομές σε μεγάλες αποστάσεις με μεγάλη ακρίβεια είναι σημαντικό να γνωρίζουμε κάτω από ποιές συνθήκες είναι δυνατό να πάρουμε δομές που είναι περιοδικές. Στο σχήμα 6 παρουσιάζουμε ένα χάρτη από υπολογισμούς που πραγματοποίησαμε για τον προσδιορισμό των κατασκευαστικών ορίων της διεργασίας αυτής καθώς και την επίδραση της ελαστικότητας του πολυμερικού υλικού σε αυτά. Κάθε σημείο στο διάγραμμα αυτό αντιστοιχεί σε μια προσομοίωση για τη δεδομένη τιμής της απόστασης μεταξύ των προεξοχών του πανω ηλεκτροδίου και του αντίστοιχου αριθμού *Wi*. Οι ανοιχτοί κύκλοι δηλώνουν περιπτώσει όπου η λύση χαρακτηριζεται ως περιοδική και οι δομές του υμένα ακολουθούν πιστά τη δομή του ηλεκτροδίου, ενώ τα τριγωνα δηλώνουν περιπτώσεις όπου οι λύσεις παύουν να είναι περιοδικές. Οι γεμάτοι κύκλοι δηλώνουν το οριακό σημείο. Το κριτήριο που χρησιμοποιήσαμε για τη διακριση μεταξύ των δύο καταστάσεων είναι το εξής: όταν η απόκλιση κάθε κορυφής από την μέση τιμή είναι μικρότερη από 0.001 η δομή θεωρείται περιοδική ενώ όταν η απόκλιση είναι μεγαλύτερη θεωρούνται μη περιοδικές. Από το σχήμα είναι εμφανές ότι η ελάχιστη απόσταση μεταξύ των προεξοχών, *s*, αυξάνεται με την αύξηση του αριθμού *Wi*. Η ελάχιστη απόσταση, *s*, είναι ουσιαστικά το κατασκευαστικό όριο της διεργασίας αυτής και όπως φαίνεται όσο πιο ελαστικό ειναι το υλικό του υμένα τόσο το κατασκευαστικό αυτό όριο μεγαλώνει, ωστόσο για μεγάλες τιμές του αριθμού *Wi* επέρχεται κορεσμός.

4. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Bandyopadhyay D., Sankar P. D., Reddy, Sharma A., Electric field and van der waals force induced instabilities in thin viscoelastic bilayers, Physics of Fluids 24 (7) (2012) 074106–074106–29.

Christodoulou K., Scriven L., Discretization of free surface flows and other moving boundary problems, Journal of Computational Physics 99 (1) (1992) 39–55.

Craster R. V., O. K. Matar, Electrically induced pattern formation in thin leaky dielectric films, Phys. Fluids 17 (2005) 032104.

Dimakopoulos Y., Tsamopoulos J., A quasi-elliptic transformation for moving boundary problems with large anisotropic deformations, Journal of Computational Physics 192 (2) (2003) 494522.

Espin L., Corbett A., Kumar S., Electrohydrodynamic instabilities in thin viscoelastic films AC and DC fields, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 196 (2013) 102–111.

Heier J., Groenewold J., Steiner U., Pattern formation in thin polymer films by spatially modulated electric fields, Soft Matter 5 (2009) 3997.

Lin Z., Kerle T., Baker S. M., Hoagland D. A., Schäffer E., Steiner U., Russell T. P., Electric field induced instabilities at liquid/liquid interfaces, The Journal of Chemical Physics 114 (5) (2001) 2377.

Lin Z., Kerle T., Russell T. P., Schäffer E., Steiner U., Structure formation at the interface of Liquid/Liquid bilayer in electric field, Macromolecules 35 (10) (2002) 3971–3976.

Pease L. F., Russel W. B., Linear stability analysis of thin leaky dielectric films subjected to electric fields, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 102 (2) (2002) 233–250.
Pease L. F., Russel W. B., Electrostatically induced submicron patterning of thin perfect and leaky dielectric films: A generalized linear stability analysis, The Journal of Chemical Physics 118 (8) (2003) 3790–3803.
Pease L. F., Russel W. B., Limitations on length scales for electrostatically induced submicrometer pillars and holes, Langmuir 20 (3) (2004) 795–804.
Phan-Thien N., Tanner R. I., A new constitutive equation derived from network theory, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 2 (1977) 353.
Roberts S. A., Kumar S., AC electrohydrodynamic instabilities in thin liquid films, Journal of Fluid Mechanics 631 (2009) 255.
Schäffer E., Thurn-Albrecht T., Russell T. P., Steiner U., Electrically induced structure formation and pattern transfer, Nature 403 (2000) 874.
Schäffer E. Thurn-Albrecht T., Russell T. P., Steiner U., Electrohydrodynamic instabilities in polymer films, Europhysics Letters (EPL) 53 (4) (2001) 518–524.
Shankar V., Sharma A., Instability of the interface between thin fluid films subjected to electric fields, J. Colloid Interface Sci. 274 (2004) 294–308.
Tomar G., Shankar V., Sharma A., Biswas G., Electrohydrodynamic instability of a confined viscoelastic liquid film, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 143 (2-3) (2007) 120–130.
Tsiveriotis K., Brown R. A., Boundary-conforming mapping applied to computations of highly deformed solidification interfaces, International Journal for Numerical Methods in Fluids 14 (8) (1992) 9811003.
Wu L., Chou S., Electrohydrodynamic instability of a thin film of viscoelastic polymer underneath a lithographically manufactured mask, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 125 (2-3) (2005) 91–99.
Wu N., Pease L. F., Russel W. B., Electric-field-induced patterns in thin polymer films: weakly nonlinear and fully nonlinear evolution, Langmuir 21 (26) (2005) 12290–12302.

ABSTRACT

We investigate the non-linear dynamics of the electrohydrodynamic instability of a viscoelastic polymeric film under a patterned mask. We develop a computational model and carry out 2D numerical simulations fully accounting for the flow and electric field in both phases. We perform a thorough parametric study and investigate the influence of the various rheological parameters, the applied voltage and the period of the protrusions of the mask in order to define the fabrication limits of this process in the case of patterned electrodes. Our results indicate that the effect of elasticity is destabilizing, in agreement with earlier studies in the literature based on linear stability analysis for homogeneous electric fields. We also find that for low values of the Ca number a metastable state arises with finite interfacial deformation the amplitude of which compares favourably with experimental observations in contrast with earlier predictions using linear theory. The critical voltage for this metastable state appears to be unaffected by the elasticity of the material. On the other hand, it is shown that viscoelasticity affects the fabrication limit on the period of the protrusions of the top electrode.

Κρούση σταγόνας πάνω σε σφαιρικό σωματίδιο χρησιμοποιώντας τη μεθοδολογία VOF

Ηλίας Μαλγαρινός[1,2],*, Νικόλαος Νικολόπουλος[1,2], Μανώλης Γκαβαϊσές[1]
1: School of Engineering and Mathematical Sciences, City University London, Northampton Square, EC1V 0HB London, UK
2: Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογίας, Ινστιτούτο Χημικών Διεργασιών και Ενεργειακών Πόρων, Αιγιαλείας 52, Μαρούσι, Αθήνα, 15125, Ελλάδα
Μαλγαρινός Ηλίας, *Ανταποκρ. Συγγραφέας, Υποψήφιος Διδάκτορας Μηχανολόγος Μηχανικός (Ilias.Malgarinos.1@city.ac.uk)
Νικολόπουλος Νικόλαος, Marie Curie Ερευνητής, Κύριος Ερευνητής ΕΚΕΤΑ/ΙΔΕΠ Μηχανολόγος Μηχανικός (Nikolaos.Nikolopoulos.1@city.ac.uk, n.nikolopoulos@certh.gr)
Γκαβαϊσες Μανώλης, Καθηγητής City University London (m.gavaises@city.ac.uk)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

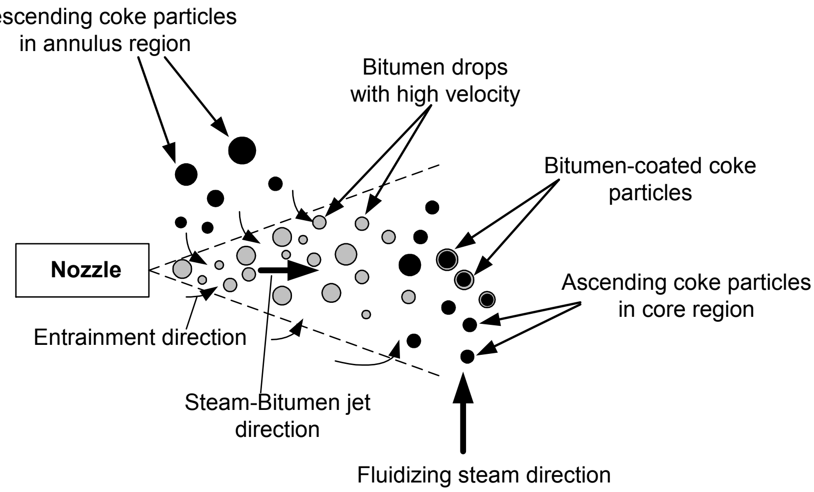
Σε αυτή την εργασία παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της υπολογιστικής προσομοίωσης της κρούσης μιας υγρής σταγόνας πάνω σε στερεό σφαιρικό σωματίδιο. Το φαινόμενο αυτό εμφανίζεται σε αρκετές τεχνολογικές εφαρμογές, με κύρια αυτή των μονάδων καταλυτικής πυρόλυσης (Fluid Catalytic Cracking, FCC) στην πετρελαιοβιομηχανία, όπου βαριές ενώσεις υδρογονανθράκων (όπως κλάσματα πίσσας) «διασπώνται» σε ελαφρύτερες ενώσεις υψηλότερης τεχνολογικής αξίας (όπως βενζίνη). Για την πρόλεξη της εξέλιξης της κρούσης υπό ίσο-θερμοκρασιακές συνθήκες, χρησιμοποιείται η μεθοδολογία Volume of Fluid Method (VOF) δεδομένου ότι οι δύο φάσεις (αέριο-υγρό) δεν αναμειγνύονται. Σε όλες τις μοντελοποιήσεις η υγρή φάση θεωρήθηκε ότι είναι νερό, και η αέρια φάση αέρας, υπό συνθήκες θερμοκρασίας δωματίου, καθώς σε πρώτη φάση, ο κύριος σκοπός ήταν ο προσδιορισμός των κύριων παραμέτρων που επηρεάζουν το φαινόμενο (επαφή υγρού-στερεού), και όχι ο φυσικοχημικός προσδιορισμός της καταλυτικής πυρόλυσης. Το σφαιρικό σωματίδιο μοντελοποιήθηκε ως στερεό τοίχωμα (επιφάνεια), ενώ για την ανάπτυξη του υπολογιστικού πλέγματος χρησιμοποιείται μια μέθοδος αυτόματης τοπικής πύκνωσης. Συνολικά εξετάστηκαν 9 περιπτώσεις με παραμέτρους τον αριθμό Weber ($=\rho u^2 D/\sigma$) ο οποίος κυμαινόταν από 8 έως 80, και το λόγο διαμέτρου σταγόνας-σωματιδίου DTP (Droplet To Particle size ratio), ο οποίος κυμαινόταν από 0.31 έως 1.24. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα της παραμετρικής μελέτης, καθορίστηκαν οι πιθανές εκβάσεις της κρούσης σταγονιδίου -σωματιδίου.

Λέξεις Κλειδιά: σταγόνα, Volume of Fluid, κρούση

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η κρούση σταγόνων υγρού σε στερεές επιφάνειες είναι ένα πολύ ενδιαφέρον φυσικό φαινόμενο το οποίο λαμβάνει χώρα σε πολλές μηχανολογικές εφαρμογές. Παραδείγματα αποτελούν η ψύξη θερμών επιφανειών (όπως ηλεκτρονικά κυκλώματα) με τη έγχυση υγρών σταγονιδίων (spray cooling), η επίστρωση στερεών επιφανειών (spray coating), η αποφυγή της παγοποίησης στην επιφάνεια των πτερυγίων των αεροπλάνων που προκύπτει μετά την κρούση και στερεοποίηση σταγονιδίων υδρατμών που βρίσκονται στα σύννεφα.

Μία άλλη εφαρμογή της κρούσης σταγονιδίων σε στερεές επιφάνειες, η οποία αποτελεί και τον κύριο σκοπό της εν λόγω εργασίας, αφορά την πετρελαιοβιομηχανία, και πιο συγκεκριμένα τις μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης (Fluid Catalytic Cracking). Αυτή τη στιγμή, το 45% της βενζίνης που χρησιμοποιείται σε παγκόσμιο επίπεδο, προέρχεται από τις μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης, αλλά και άλλες βοηθητικές μονάδες όπως η μονάδα αλκυλίωσης (alkylation unit). Ο κύριος σκοπός μιας μονάδας FCC είναι η μετατροπή «βαριών» κλασμάτων καυσίμων, που ονομάζονται gas oil, τα οποία συνήθως προέρχονται από την κλασματική απόσταξη του πετρελαίου, σε «πιο ελαφριά» προϊόντα, όπως η βενζίνη ή το υγροποιημένο πετρέλαιο (LPG). Η αντίδραση «διάσπασης» (cracking reaction) όπως ονομάζεται, αφορά στη «διάσπαση» υγρών ενώσεων μακριών αλυσίδων υδρογονανθράκων οι οποίες έχουν μεγάλο μοριακό βάρος, σε προϊόντα με πιο κοντές αλυσίδες ανθράκων τα οποία είναι τεχνολογικά πιο χρήσιμα. Η εν λόγω αντίδραση λαμβάνει χώρα στον αντιδραστήρα καταλυτικής πυρόλυσης (FCC reactor), όπου οι υγροί υδρογονάνθρακες αφού εγχύονται σε μορφή σταγονιδίων, έρχονται σε επαφή με στερεά σωματίδια καταλυτών. Τα στερεά σωματίδια είναι ρευστοποιημένα και αναδεύουν στο εσωτερικό του αντιδραστήρα. Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται ένα στιγμιότυπο της ροής μέσα στον αντιδραστήρα, όπου εγχύονται σταγόνες κλασμάτων πίσσας (bitumen drops).



Σχήμα 1. Στιγμιότυπο στην περιοχή έγχυσης υδρογονανθράκων σε μια μονάδα καταλυτικής πυρόλυσης (FCC)

Ιδεατά, χάρη στην πολύ υψηλή θερμοκρασία των στερεών σωματιδίων, υψηλότερη από το σημείο βρασμού του υγρού, η επαφή τους με τα σταγονίδια του υγρού οδηγεί άμεσα στην εξάτμιση αυτών αμέσως μετά την έγχυσή τους στο εσωτερικό του αντιδραστήρα. Λαμβάνοντας υπόψη ότι ο λόγος κατά μάζα υγρού προς στερεά σωματίδια που βρίσκονται στο εσωτερικό του αντιδραστήρα είναι περίπου 4:1 έως 10:1, προκύπτει ότι η αλληλεπίδραση που έχουν τα υγρά σταγονίδια με τα στερεά σωματίδια είναι πολύ σημαντική στην αποτελεσματικότητα της μετατροπής των βαριών ενώσεων σε ελαφρύτερες, άρα και της συνολικής απόδοσης της μονάδας. Σε αυτή την εργασία, χρησιμοποιώντας την υπολογιστική ρευστοδυναμική (CFD), θα επιχειρηθεί να αναλυθεί το φαινόμενο αυτό, δηλαδή η κρούση μιας σταγόνας σε ένα στερεό σωματίδιο, από την υδροδυναμική του σκοπιά, με σκοπό να προσδιοριστούν οι παράγοντες που επηρεάζουν τη φυσική του προβλήματος και να επιτευχθεί μεγαλύτερο ποσοστό μετατροπής βαριών κλασμάτων καυσίμου στις μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης.

2. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

2.1 Μοντέλο διφασικής ροής (VOF)

Σε αυτή την εργασία, το μοντέλο Volume of Fluid Method (VOF) των Hirt και Nichols (Hirt and Nichols, 1981) χρησιμοποιείται για την πρόλεξη της κρούσης ενός σταγονιδίου σε σφαιρικό σωματίδιο. Η μεθοδολογία VOF χρησιμοποιείται για την προσομοίωση φαινομένων διφασικών ροών, όπου οι δύο φάσεις δεν αναμειγνύονται. Ανήκει στην κατηγορία των μοντέλων όπου η ακρίβεια είναι τόσο υψηλή ώστε να μπορεί να παρακολουθείται η κίνηση της διεπιφάνειας μεταξύ των δύο φάσεων (interface tracking). Σύμφωνα με το μοντέλο VOF (περισσότερες πληροφορίες μπορούν να βρεθούν στις δουλειές (Nikolopoulos et al., 2005, Strotos et al., 2008)), μία εξίσωση ορμής και μία συνέχειας επιλύεται και για τις δύο φάσεις, μαζί με την εξίσωση της συνέχειας ενός βαθμωτού μεγέθους, ονόματι κλάσμα όγκου (volume fraction) η οποία χρησιμοποιείται για την παρακολούθηση της κίνησης της μίας φάσης ως προς την άλλη (σε αυτή την περίπτωση του υγρού). Το κλάσμα όγκου

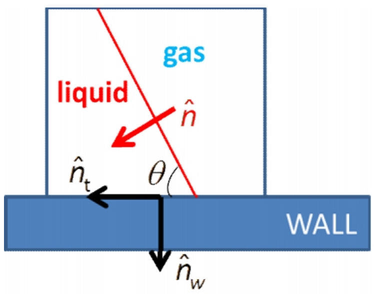
παίρνει την τιμή 0 όταν το υπολογιστικό κελί καλύπτεται από αέρα, και την τιμή 1 όταν το κελί καλύπτεται εξ ολοκλήρου από υγρό. Οι ιδιότητες του «μίγματος» σε κάθε κελί προκύπτουν από στάθμιση με βάση την τιμή του κλάσματος όγκου. Η επιφανειακή τάση εισέρχεται στην εξίσωση της ορμής σαν μια ογκική δύναμη με βάση το μοντέλο των Brackbill κ.α.(Brackbill et al., 1992). Οι εξισώσεις του υπολογιστικού μοντέλου επιλύονται στο εμπορικό πρόγραμμα ANSYS FLUENT, ενώ περισσότερες πληροφορίες για τη χρησιμοποίηση του μοντέλου VOF από το FLUENT μπορούν να βρεθούν στο εγχειρίδιο χρήσης του προγράμματος (FLUENT 14.5, 2011).
Για τη διακριτοποίηση του όρου συναγωγής στην εξίσωση του volume fraction χρησιμοποιείται το μοντέλο CICSAM (Ubbink, 1997), για τον ίδιο όρο στην εξίσωση της ορμής χρησιμοποιείται σχήμα δεύτερης τάξης ακρίβειας (second order upwind), ενώ για τη σύζευξη της εξίσωσης πίεσης με την ταχύτητα χρησιμοποιείται το σχήμα PISO. Η διακριτοποίηση στον χρόνο ακολουθεί πεπλεγμένο σχήμα πρώτης τάξης ακρίβειας (Implicit first order), ενώ η εξίσωση του volume fraction λύνεται στην αρχή του χρονικού βήματος χρησιμοποιώντας τις τιμές από το προηγούμενο χρονικό βήμα (Explicit scheme).

2.2 Μοντέλο επαφής σταγόνας-στερεού τοιχώματος (contact angle model)

Στις περιπτώσεις που προσομοιώθηκαν, είναι δεδομένο ότι πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένα μοντέλο που θα προσομοιώνει την επαφή του υγρού με το στερεό τοίχωμα. Σε αυτό το μοντέλο, το πόσο εύκολο ή δύσκολο είναι να διαβρέχεται η στερεή επιφάνεια από το υγρό, καθορίζεται από τη γωνία επαφής της σταγόνας με το στερεό τοίχωμα (contact angle). Σύμφωνα λοιπόν με το μοντέλο που έχει παρουσιασθεί τόσο στη δουλειά των Brackbill κ.α (Brackbill et al., 1992) όσο και στον Ubbink (Ubbink, 1997), και σε αρκετές δουλειές που ακολούθησαν, ο όρος της επιφανειακής τάσης στο τοίχωμα προσαρμόζεται έτσι ώστε να προκύψει η επιθυμητή γωνία. Έτσι, το κάθετο στην επιφάνεια διάνυσμα για τα κελία του τοίχου όπου υπάρχει διεπιφάνεια, αλλάζει με βάση τον τύπο:

$$\hat{n} = \hat{n}_w \cos\theta + \hat{n}_t \sin\theta \tag{1}$$

Όπου θ είναι η δεδομένη από πριν γωνία επαφής, ενώ οι υπόλοιπες μεταβλητές φαίνονται στο σχήμα που ακολουθεί.



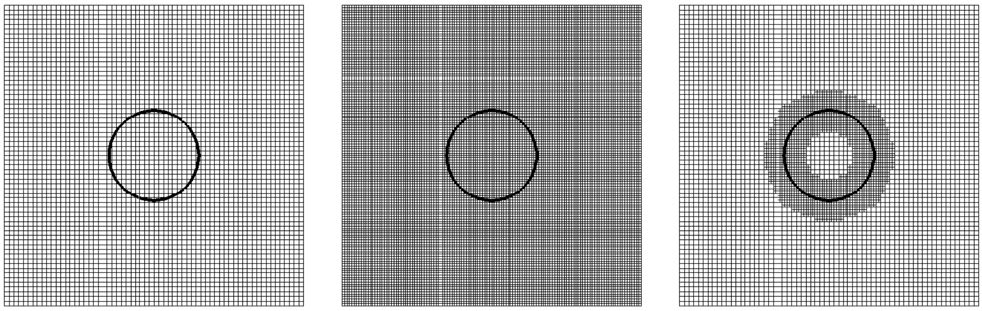
Σχήμα 2. Οριακό κελί στο τοίχωμα και μεταβλητές που αφορούν το μοντέλο γωνίας επαφής

Αυτό που επιτυγχάνεται με τη χρήση του ανωτέρου τύπου, είναι ότι αλλάζοντας το κάθετο διάνυσμα $\hat{n}$, αλλάζει ο υπολογισμός της καμπυλότητας (curvature) και τελικά ο όρος της επιφανειακής τάσης που εισέρχεται στην εξίσωση της ορμής για τα συγκεκριμένα κελιά. Περισσότερες πληροφορίες μπορούν να βρεθούν στις δουλειές των Brackbill κ.α (Brackbill et al., 1992) και Ubbink (Ubbink, 1997).

2.2 Μοντέλο αυτόματης τοπικής πύκνωσης πλέγματος

Ένας εύκολος τρόπος για να επιτευχθεί μεγαλύτερη ακρίβεια στην περιοχή της διεπιφάνειας, η οποία είναι και η πιο ευαίσθητη περιοχή για τη συγκεκριμένη μεθοδολογία, αποτελεί η χρήση ολοένα και περισσότερο πυκνών υπολογιστικών πλεγμάτων. Όμως η χρήση τέτοιων πλεγμάτων επιβαρύνει την υπολογιστικό κόστος του προβλήματος και έχει ως άμεσο επακόλουθο τη σπατάλη μεγάλων χρονικών διαστημάτων και περισσότερων υπολογιστικών πόρων. Για το λόγο αυτό αναπτύχθηκε ένα μοντέλο αυτόματης τοπικής πύκνωσης, βασισμένο στη δουλειά των Θεοδωρακάκου και Μπεργελέ (Theodorakakos and Bergeles, 2004), σύμφωνα με το οποίο το υπολογιστικό πλέγμα πυκνώνει τοπικά στην περιοχή της διεπιφάνειας, ενώ πιο έξω, στις περιοχές του υγρού ή του αερίου είναι πιο αραιό. Η τοπική αυτή πύκνωση επιτυγχάνεται ανά συγκεκριμένο αριθμό χρονικών βημάτων (σε αυτή την εργασία ανά 20) έτσι ώστε να μπορεί αφενός να ακολουθήσει την κίνηση της διεπιφάνειας και αφετέρου να διασφαλίσει ότι η διεπιφάνεια δε θα «αποδράσει» ποτέ από το πιο πυκνό κομμάτι του υπολογιστικού χωρίου. Στο επόμενο σχήμα παρουσιάζεται ως παράδειγμα μια περίπτωση όπου χρησιμοποιώντας ένα επίπεδο τοπικής πύκνωσης χρησιμοποιούνται πολύ λιγότερα κελιά από την περίπτωση της ομοιόμορφης πύκνωσης.

Αρχικό πλέγμα 4,096 κελιά | Ομοιόμορφη πύκνωση 16,384 κελιά | Τοπική πύκνωση 5,704 κελιά



Σχήμα 3. Οικονομία σε υπολογιστικούς πόρους χρησιμοποιώντας το μοντέλο της τοπικής πύκνωσης

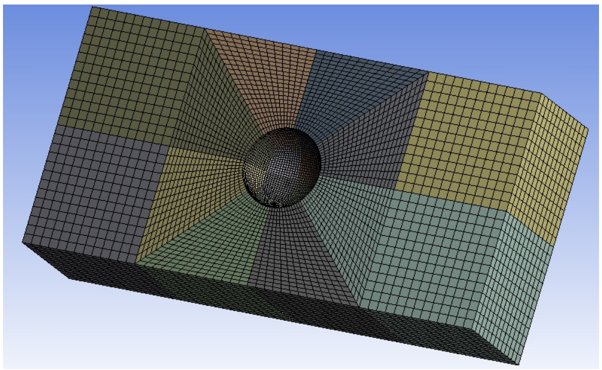
Το μοντέλο της τοπικής πύκνωσης εισάγεται μέσω ενός προγραμματιστικού κώδικα (User Defined Function, UDF) στο κυρίως πρόγραμμα του ANSYS FLUENT.
Ο αλγόριθμος που ακολουθείται είναι ο ακόλουθος:

1. Βρίσκεται η διεπιφάνεια (τα κελιά που διέρχεται η ισογραμμή volume fraction = 0.5 για 2D, ισοεπιφάνεια για 3D)
2. Χρησιμοποιώντας μια μέθοδο fast marching, αντίστοιχη της (Elias et al., 2007) υπολογίζεται για κάθε κελί η ελάχιστη επιφάνεια από τη διεπιφάνεια.
3. Με βάση αυτή την απόσταση από τη διεπιφάνεια, και την απόσταση που ζητείται από τον χρήστη να έχει το κάθε πλεγματικό επίπεδο από αυτή (ή μεταξύ τους τα επίπεδα), καταχωρείται σε μια θέση μνήμης ο αριθμός που δηλώνει το πλεγματικό επίπεδο που πρέπει να επιτευχθεί σε κάθε κελί.
4. Τέλος, η πύκνωση των κελιών γίνεται σε στάδια, ανάλογα με τον αριθμό των πλεγματικών επιπέδων N:
   a. 1^{o} στάδιο: πυκνώνονται τα αραιά κελιά (lev0) και αραιώνουν τα πυκνά (levN)
   b. 2^{o} στάδιο: πυκνώνονται τα lev1 και αραιώνουν τα levN-1 κ.ο.κ

3. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ ΚΑΙ ΠΕΡΙΠΤΩΣΕΙΣ ΠΟΥ ΜΕΛΕΤΗΘΗΚΑΝ

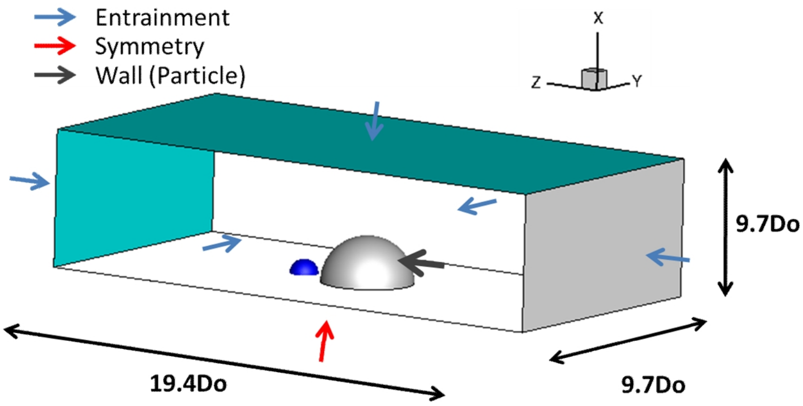
3.1 Ανάπτυξη πλέγματος για το στερεό σωματίδιο

Το υπολογιστικό χωρίο που χρησιμοποιήθηκε παρουσιάζεται στο επόμενο σχήμα. Το πλέγμα αποτελείται μόνο από εξαεδρικά στοιχεία, καθώς με τη χρήση τέτοιων στοιχείων αναμένεται υψηλότερη ακρίβεια στην εξίσωση μεταφοράς της υγρής φάσης (volume fraction equation), που παρουσιάζει δυσκολίες σε έντονες χωροταξικές διακυμάνσεις ενός μη δομημένου πλέγματος.



Σχήμα 4. Υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε στις μοντελοποιήσεις

Όπως φαίνεται και από το σχήμα, μοντελοποιήθηκε η μισή σταγόνα (και το μισό σωματίδιο) σε τρεις διαστάσεις, καθώς το φαινόμενο, μπορεί να θεωρηθεί ως σχεδόν συμμετρικό (180^o), γνωρίζοντας ότι ορισμένες μορφές που μπορεί να πάρει το υγρό και οι οποίες χαρακτηρίζονται από ασυμμετρίες ως προ την επιφάνεια που διέρχεται από τη μέση της σταγόνας, δεν μπορούν να επιλυθούν υπό την παρούσα προσομοίωση (180^o). Επίσης, το υπολογιστικό κόστος για τη μοντελοποίηση ολόκληρου του σταγονιδίου (360^o) είναι πολύ μεγάλο, ειδικά για την εκτέλεση παραμετρικής μελέτης των κυριότερων παραγόντων που επηρεάζουν το φαινόμενο, που είναι και ο σκοπός της παρούσας εργασίας.
Οι οριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν για τη μοντελοποίηση της κρούσης του σταγονιδίου στο στερεό σωματίδιο παρουσιάζονται στο επόμενο σχήμα. Το στερεό σωματίδιο αντιπροσωπεύτηκε από ένα σταθερό στερεό τοίχωμα, όπου το σταγονίδιο προσπίπτει με μια αρχική ταχύτητα, ενώ συμμετρικές οριακές συνθήκες χρησιμοποιούνται στην επιφάνεια που κόβει τη σταγόνα στη μέση. Οι υπόλοιπες οριακές συνθήκες ορίζονται ως συνθήκες ανοικτής ροής.



Σχήμα 5. Οριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν

3.2 Περιπτώσεις που επιλύθηκαν

3.2.1 Κρούση σταγόνας νερού σε στερεό τοίχωμα (σύγκριση με πειραματικές τιμές)

Ύστερα από εκτενή μελέτη στη βιβλιογραφία, διαπιστώθηκε ότι τα πειράματα κρούσης σταγονιδίου σε στερεό σωματίδιο (Bakshi et al., 2007, Hardalupas et al., 1999, Levin and Hobbs, 1971), αλλά και οι υπολογιστικές προσομοιώσεις (Bangonde et al., 2009, Gac and Gradoń, 2014, Ge and Fan, 2007, Gunjal et al., 2003, Mitra et al., 2013, Pasandideh-Fard et al., 2001) είναι περιορισμένα. Επιπλέον, οι περιπτώσεις που αφορούν ισοθερμοκρασιακές συνθήκες, όπως πρόκειται να προσομοιωθεί σε αυτή την εργασία, περιορίζονται μόνο σε 2 δουλειές. Οι Bangonde κ.α. (Bangonde et al., 2009) παρουσίασαν αποτελέσματα υπολογιστικής προσομοίωσης, καθώς και πειραματικές μετρήσεις για την κρούση μιας σταγόνας νερού σε στερεό σωματίδιο υπό συνθήκες βαρύτητας. Ομοίως, οι Mitra κ.α. (Mitra et al., 2013) παρουσίασαν αντίστοιχες δουλειές, και επιπλέον διεξήγαγαν πειράματα σε υψηλότερες θερμοκρασίες του στερεού σωματιδίου όπου εμφανίζεται και η περίπτωση film boiling, καθώς και χρησιμοποίησαν πέραν του νερού, ακετόνη και ισοπροπανόλη.

Και στις δύο εργασίες που αναφέρθηκαν, χρησιμοποιήθηκαν σταγόνες νερού για τις ισοθερμοκρασιακές κρούσεις, συνεπώς με σκοπό την άμεση σύγκριση των αποτελεσμάτων, το υγρό που θα μοντελοποιηθεί στην παρούσα εργασία είναι το νερό. Επίσης, πρέπει να αναφερθεί σε αυτό το σημείο ότι στην πρώτη φάση δοκιμών που χρησιμοποιείται το υπολογιστικό μοντέλο, ο κύριος σκοπός είναι ο αρχικός προσδιορισμός των κύριων παραμέτρων που επηρεάζουν το φαινόμενο της επαφής υγρού-στερεού, και όχι συγκεκριμένα η χρησιμοποίηση των ιδιοτήτων που υπάρχουν στις μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης στην πραγματικότητα. Έτσι, σε αυτή την εργασία, επιλέχθηκε να προσομοιωθεί αρχικά μια περίπτωση κρούσης σταγονιδίου νερού από τη δουλειά των Mitra κ.α. (Mitra et al., 2013), όπου η αρχική ταχύτητα της σταγόνας ήταν μικρή. Οι Mitra κ.α. (Mitra et al., 2013) επίσης, παρουσίασαν αποτελέσματα υπολογιστικής προσομοίωσης τα οποία μπορουν να συγκριθούν άμεσα με το μοντέλο της παρούσας εργασίας. Στη μοντελοποίησή τους, χρησιμοποίησαν ως γωνία επαφής μεταξύ του υγρού και του στερεού τις 90^o, μια τιμή που αν ληφθεί υπόψη ο τύπος 1, καταλήγει στην χρήση οριακής συνθήκης μηδενικής πρώτης κλίσης για την επιφανειακή τάση. Συνεπώς η χρήση γωνίας 90^o χρησιμεύει στην πιστοποίηση ότι το υπολογιστικό μοντέλο είναι ικανό να περιγράψει υδροδυναμικά την αλληλεπίδραση του υγρού σταγονιδίου με το στερεό σωματίδιο χωρίς την επιρροή της γωνίας επαφής. Συνολικά, 2 περιπτώσεις προσομοιώθηκαν, με παράμετρο το μέγεθος του υπολογιστικού πλέγματος, έτσι ώστε να εκτιμηθεί η ανεξαρτησία που έχει το πλέγμα στα αποτελέσματα. Οι αρχικές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτές τις περιπτώσεις παρουσιάζονται στον πίνακα παρακάτω.

Case No.	**U_0 (m/s)**	**D_0 (mm)**	**Dp (mm)**	**DTP**	**θ (o)**	**We**	**Re**	**Refin. Lev**	**Cells in R**
1	0.434	3.1	10	0.31	90	8	1336	4	52-82
2	0.434	3.1	10	0.31	90	8	1336	5	104-164

Πίνακας 1. Αρχικές συνθήκες μοντελοποίησης

Όπου U_0, D_0 η αρχική ταχύτητα και διάμετρος αντίστοιχα της σταγόνας, D_P η διάμετρος του στερεού σωματιδίου, DTP ο λόγος διαμέτρων σταγόνας προς σωματίδιο (Droplet To Particle size ratio), We ο αδιάστατος αριθμός Weber ($=\rho u^2 D/\sigma$), ρ η πυκνότητα του υγρού (σε kg/m^3), σ ο συντελεστής επιφανειακής τάσης (σε N/m), Re ο αδιάστατος αριθμός Reynolds ($=\rho uD/\mu$), μ η δυναμική συνεκτικότητα (σε kg/ms), Refin Lev ο αριθμός των επιπέδων της τοπικής πύκνωσης και Cells in R είναι ο αριθμός των υπολογιστικών κελιών που καλύπτουν την ακτίνα της σταγόνας. Επειδή όπως φαίνεται και από το Σχήμα4 το υπολογιστικά κελιά δεν έχουν το ίδιο μέγεθος, ο αριθμός αυτός δεν έχει μια μονοσήμαντη τιμή, αλλά κυμαίνεται στον Πίνακα1. Το ρευστό που μοντελοποιήθηκε ήταν νερό και το αέριο αέρας, και τα δύο σε συνθήκες $T=20^oC$, P=1atm.

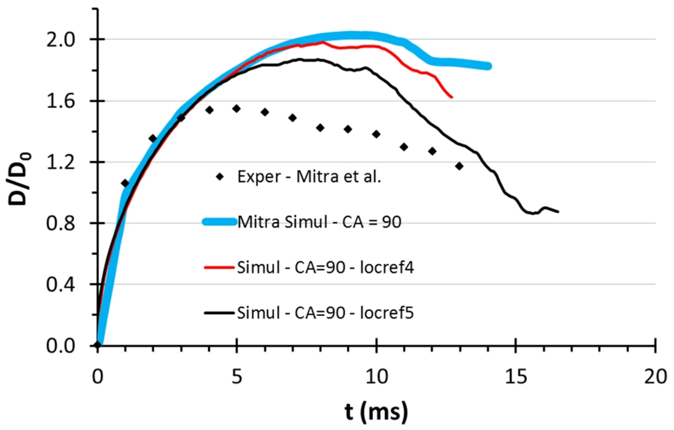
3.2.2 Παραμετρική μελέτη κρούσης σταγόνας νερού (ταχύτητα πρόσκρουσης, μέγεθος σωματιδίου)

Μετά την πιστοποίηση ότι το μοντέλο μπορεί να προσομοιώσει υδροδυναμικά την κρούση της σταγόνας νερού σε στερεό σωματίδιο, επιλέχθηκε η παραμετρική μελέτη της κρούσης σταγόνας με ίδιες ιδιότητες (νερό) σε σωματίδιο με διαφορετικό μέγεθος και διαφορετική αρχική ταχύτητα πρόσκρουσης. Καθώς στις μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης ο λόγος μεγέθους σταγόνας προς σωματίδιο (DTP) είναι της τάξης 1-10, και λαμβάνοντας υπόψη ότι στην προηγούμενη περίπτωση ο λόγος αυτός ήταν 0.31, για το λόγο αυτό επιλέχθηκε να ελεγχθούν επιπλέον 2 μικρότερα μεγέθη σωματιδίων, με διαίρεση στη μέση, διατηρώντας ίδιο το μέγεθος του σταγονιδίου. Με αυτό τον τρόπο ο λόγος DTP πιάνει τιμές 0.31, 0.62, 1.24. Επιπλέον, οι ταχύτητες πρόσκρουσης στα FCC είναι αρκετά μεγαλύτερες από αυτή που μοντελοποιήθηκε αρχικά, με αριθμό Weber = 8. Συνεπώς, επιλέχθηκε να προσομοιωθούν οι αριθμοί We 8, 40 και 80. Συνολικά, μελετήθηκαν 9 διαφορετικές περιπτώσεις, με όλους τους συνδυασμούς DTP (0.31, 0.62, 1.24) και αρχικής ταχύτητας πρόσκρουσης We (4, 40, 80). Για να επιτευχθεί αντίστοιχη ακρίβεια με την πρώτη περίπτωση ως προς το υπολογιστικό πλέγμα, καθώς το μέγεθος του σωματιδίου αλλάζει (μικραίνει), οι διαμερίσεις που χρησιμοποιήθηκαν για το σωματίδιο παραμένουν ίδιες. Έτσι, επειδή το μέγεθος σωματιδίου μειώνεται στο μισό, τότε θα πρέπει τα επίπεδα τοπικής πύκνωσης που θα χρησιμοποιηθούν να είναι κατά ένα λιγότερα. Αυτό συμβαίνει γιατί το μέγεθος της ακμής του κελιού στην επιφάνεια του σωματιδίου, για 104 διαμερίσεις που χρησιμοποιήθηκαν είναι $2\pi R/104$. Έτσι, για DTP = 0.31 χρησιμοποιήθηκαν 4 επίπεδα πύκνωσης (το αραιό στον Πίνακα1), για DTP = 0.62 , 3 επίπεδα, και για DTP = 1.24 , 3 επίπεδα.

4. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

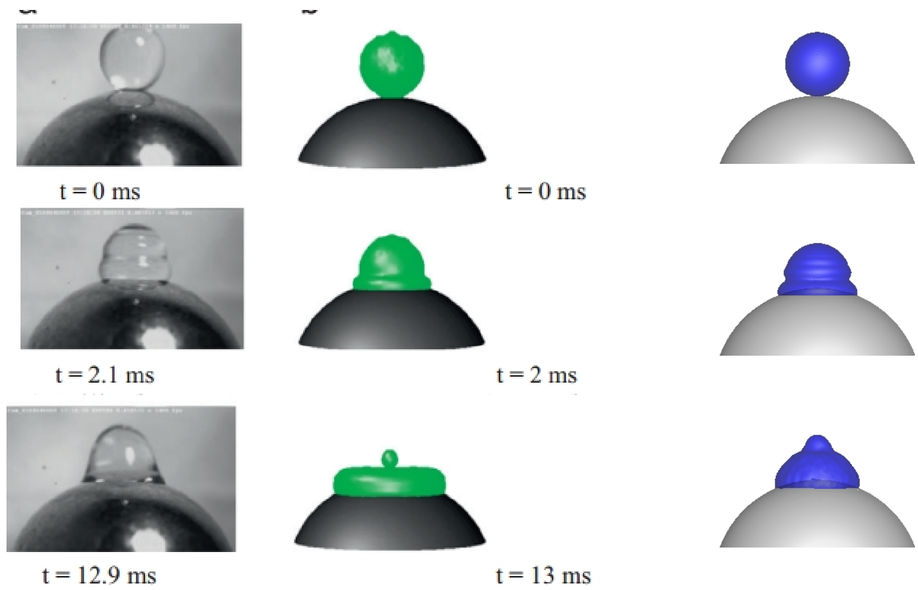
4.1 Πιστοποίηση του υπολογιστικού εργαλείου

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης για την πρώτη περίπτωση, χρησιμοποιώντας αντίστοιχα 4 και 5 επίπεδα τοπικής πύκνωσης, παρουσιάζονται στο επόμενο σχήμα, όπου ταυτόχρονα συγκρίνονται με τις πειραματικές μετρήσεις και την υπολογιστική προσομοίωση των Mitra κ.α. (Mitra et al., 2013).



Σχήμα 6. Σύγκριση με πείραμα και προσομοίωση από τη δουλειά των Mitra κ.α. (Mitra et al., 2013)

Η τάση των αποτελεσμάτων δείχνει ότι όσο το πλέγμα γίνεται πιο πυκνό, τα αποτελέσμτα μπορούν να θεωρηθούν πιο ακριβή. Επίσης, το εν λόγω μοντέλο πλησιάζει καλύτερα τα πειραματικά δεδομένα σε σύγκριση με τα αποτελέσματα από τη δουλειά των Mitra κ.α., χρησιμοποιώντας την ίδια γωνία επαφής. Όμως, επειδή στη δουλειά τους δεν αναφέρουν το ακριβές μέγεθος των κελιών στο σωματίδιο (αναφέρουν μόνο πλήθος κελιών), είναι δύσκολη η απευθείας σύγκριση των αποτελεσμάτων των δύο μοντέλων. Στο επόμενο σχήμα, φωτογραφίες από το πείραμα συγκρίνονται με τα αποτελέσματα της υπολογιστικής προσομοίωσης της δουλειάς των Mitra κ.α. και της παρούσας εργασίας. Σε γενικές γραμμές, τα αποτελέσματα της υπολογιστικής προσομοίωσης βρίσκονται σε συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις.

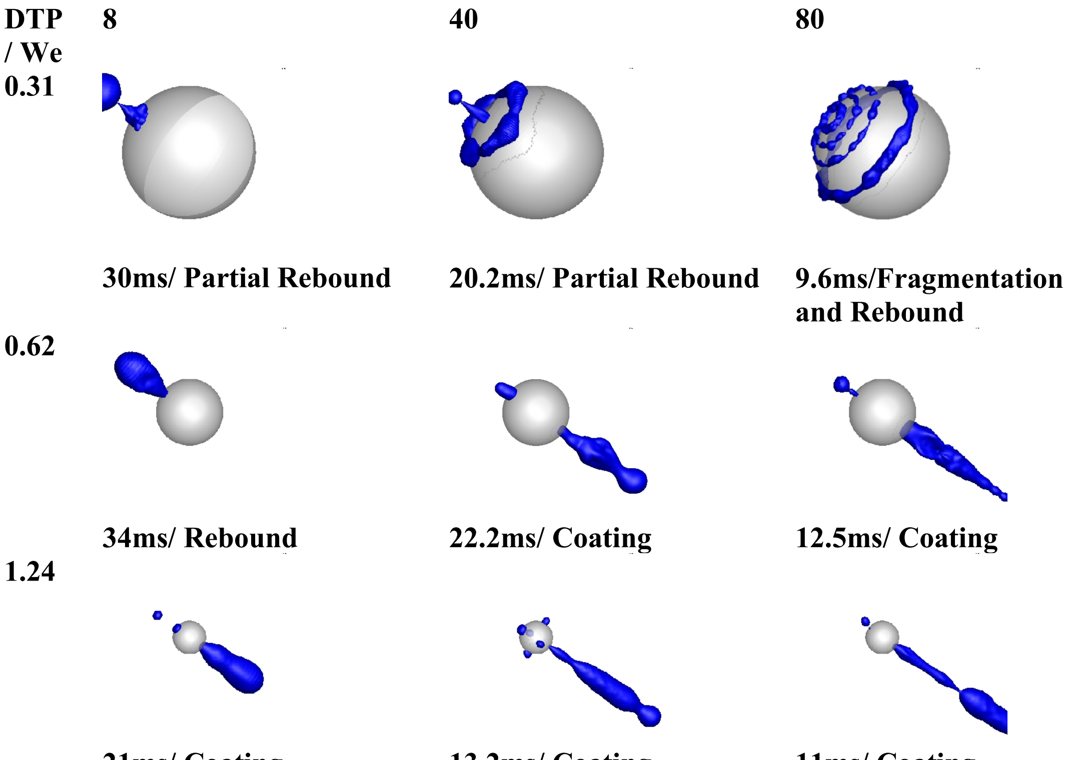


Σχήμα 7. Σύγκριση μεταξύ φωτογραφιών από το πείραμα και αποτελέσματα προσομοίωσης από τη δουλειά των Mitra κ.α. (Mitra et al., 2013), καθώς και αποτελέσματα της παρούσας εργασίας. Ο

χρόνος παρουσίασης των αποτελεσμάτων επιλέχθηκε να είναι ο ίδιος με τη δουλειά των Mitra κ.α για άμεση σύγκριση

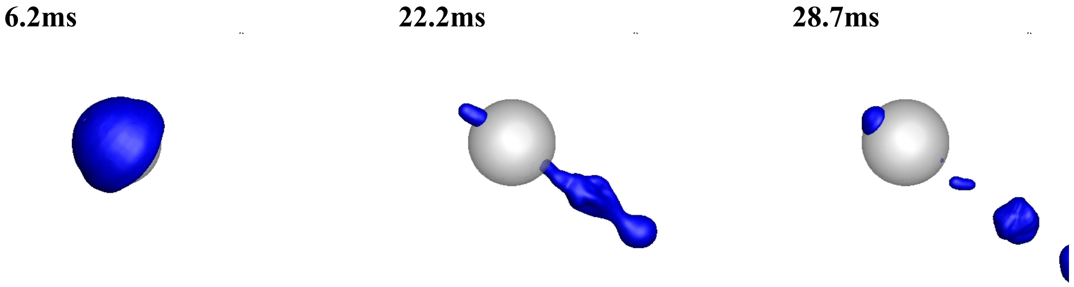
4.2 Παραμετρική διερεύνηση ταχύτητας πρόσκρουσης (We=8-80) και μεγέθους σωματιδίου (DTP=0.31-1.24)

Όλα τα αποτελέσματα της παραμετρικής μελέτης συνοψίζονται και παρουσιάζονται στο επόμενο σχήμα, όπου φαίνονται οι πιθανές εκβάσεις της κρούσης σταγονιδίου με το σωματίδιο. Είναι εμφανές ότι σε περιπτώσεις χαμηλής ταχύτητας πρόσκρουσης (We=8), το σταγονίδιο αναπηδά από το σωματίδιο, και πιο συγκεκριμένα όταν το μέγεθός του είναι μικρότερο από το σωματίδιο. Για μέσους και υψηλούς αριθμούς We, το σταγονίδιο καλύπτει το σωματίδιο και στη συνέχεια δημιουργείται μία μάζα υγρού κατάντι του σημείου πρόσκρουσης η οποία απομακρύνεται από το σωματίδιο. Αυτή η υγρή μάζα κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες μπορεί να σπάσει σε μικρό αριθμό δευτερευόντων σταγονιδίων (<=3) λόγω ασταθειών της ροής. Γενικά, για μικρές τιμές του λόγου DTP, η επαφή της σταγόνας με το σωματίδιο προσομοιάζει τη συμπεριφορά που παρατηρείται στις επίπεδες επιφάνειες, δηλαδή αναπήδηση της σταγόνας, ενώ για μεγαλύτερες τιμές του λόγου DTP, καθώς ο αριθμός We αυξάνει, η σταγόνα καλύπτει το σωματίδιο και η υγρή μάζα που απομακρύνεται σπάει σε δευτερεύοντα σταγονίδια. Όσο αυξάνεται ο αριθμός We οι αστάθειες στην υγρή μάζα που απομακρύνεται από το σωματίδιο γίνονται πιο έντονες, αυξάνοντας έτσι την πιθανότητα να σπάσει σε περισσότερα δευτερεύοντα σταγονίδια.



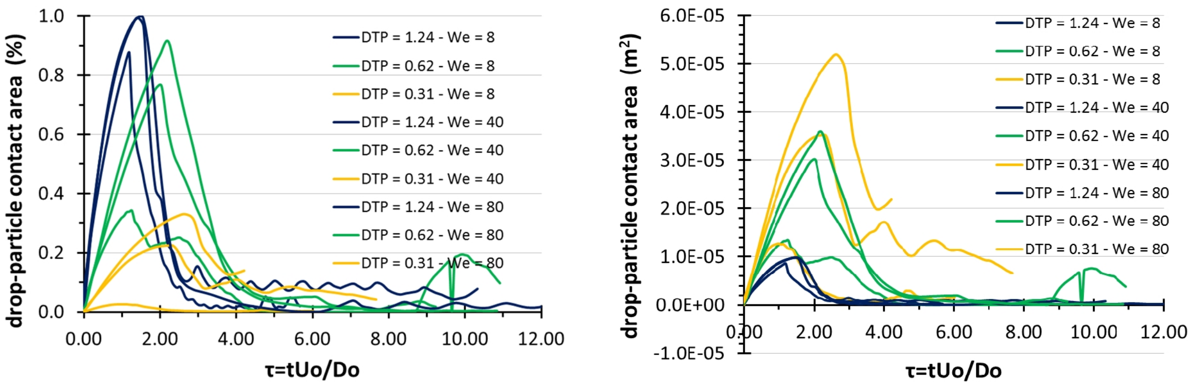
Σχήμα 8. Παραμετρική μελέτη στις πιθανές εκβάσεις της σύγκρουσης σταγόνας-σωματιδίου. Επίδραση του λόγου μεγέθους σταγόνας-σωματιδίου (DTP) και ταχύτητας πρόσκρουσης (αριθμός We)

Σε αυτό το σημείο διαπιστώνεται ότι το υπολογιστικό εργαλείο μπορεί να θεωρηθεί αρκετά αξιόπιστο για τη μελέτη τέτοιων περιπτώσεων. Χρησιμοποιώντας το, χρήσιμες πληροφορίες που αφορούν στην κρούση σταγόνας-στερεού σωματιδίου μπορούν να εξαχθούν. Στο επόμενο σχήμα η πλήρης κάλυψη του σωματιδίου από τη σταγόνα σε μέσο αριθμό We προβλέπεται από το μοντέλο. Αυτό το φαινόμενο είναι πολύ χρήσιμο για την κατανόηση των περίπλοκων μηχανισμών που λαμβάνουν χώρα στις μονάδες FCC. Το επόμενο βήμα για το εν λόγω μοντέλο είναι η προσομοίωση του φαινομένου σε μη ισοθερμοκρασιακές συνθήκες, λαμβάνοντας δηλαδή υπόψη τη μεταφορά μάζας και θερμότητας από τη σταγόνα στο περιβάλλον αέριο, καθώς πλησιάζει στο θερμότερο σωματίδιο και θερμαίνεται.



Σχήμα 9. Μηχανισμός κρούσης σταγόνας-σωματιδίου. Case: DTP=0.62, We=40. Η σταγόνα καλύπτει το σωματίδιο και στη συνέχεια δημιουργείται μια μάζα υγρού κατάντι που τελικά σπάει σε 3 δευτερεύοντα σταγονίδια

Στα επόμενα σχήματα, παρουσιάζεται το ποσοστό της επιφάνειας του σωματιδίου το οποίο καλύπτεται από υγρό κατά τη διάρκεια του φαινομένου όπως προλέγεται από το υπολογιστικό μοντέλο για όλες τις περιπτώσεις. Στο πρώτο γράφημα, παρουσιάζεται η επιφάνεια επαφής στερεού με υγρό προς τη συνολική επιφάνεια στερεού ως προς τον αδιάστατο χρόνο τ=tU_0/D_0. Παρατηρείται ότι όσο πιο μεγάλος είναι ο λόγος DTP (μικρότερο σωματίδιο), τόσο μεγαλύτερη είναι η επαφή του σταγονιδίου με το σωματίδιο, κάτι που βοηθά την αντίδραση της «διάσπασης» στα FCC.



Σχήμα 10. Επιφάνεια επαφής (στα τρία πρώτα αδιάστατη ως προς τη συνολική επιφάνεια του σωματιδίου, και στο τελευταίο με διαστάσεις m2) για όλες τις παραμετρικές περιπτώσεις

Στο δεύτερο γράφημα παρουσιάζονται όλα τα αποτελέσματα, αυτή τη φορά όμως με διαστατό τον άξονα της επιφάνειας, έτσι ώστε να εκτιμηθεί η πραγματική επιφάνεια επαφής υγρού-στερεού. Καθώς το σωματίδιο μεγαλώνει σε μέγεθος, και ο λόγος DTP μικραίνει, οι διαφορές που παρατηρούνται στην επιφάνεια επαφής με βάση την ταχύτητα είναι πολύ πιο έντονες από την περίπτωση ενός μικρού σωματιδίου. Για παράδειγμα, η επιφάνεια επαφής για το σωματίδιο με λόγο DTP=1.24 είναι αντίστοιχη και για τις τρείς ταχύτητες πρόσκρουσης. Αυτό είναι ένα πολύ σημαντικό συμπέρασμα το οποίο επιβεβαιώνεται από την πρακτική που χρησιμοποιείται στα FCC, δηλαδή την επιλογή DTP=1-10. Παρόλα αυτά, όσο τα σωματίδια γίνονται όλο και μικρότερα, η επιφάνεια επαφής είναι μικρή, οπότε τα ενεργά σημεία στην επιφάνεια του στερεού καταλύτη είναι λιγότερα. Επίσης, για τα μικρότερα σωματίδια (καταλύτες), επειδή έρχονται ολόκληρα σε επαφή με το υγρό, είναι πιο πιθανό να οδηγηθούν γρηγορότερα στην κατανάλωσή τους (spent catalyst). Το φαινόμενο αυτό συμβαίνει όταν παραμείνει υγρό στο εσωτερικό του πορώδους τους, μην αφήνοντας επιπλέον «χώρο» για περαιτέρω αντιδράσεις, οδηγώντας έτσι στη μείωση της αποτελεσματικότητας του αντιδραστήρα.

5. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Με την χρήση της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής προσομοιώθηκε το φαινόμενο της κρούσης ενός σταγονιδίου με ένα στερεό σωματίδιο. Αρχικά το υπολογιστικό μοντέλο πιστοποιήθηκε μέσα από τη σύγκριση με πειραματικές μετρήσεις για την κρούση ενός σταγονιδίου νερού σε στερεό σωματίδιο μεγαλύτερου μεγέθους και με χαμηλή ταχύτητα πρόσκρουσης. Στη συνέχεια το μοντέλο χρησιμοποιήθηκε για την ανάλυση της επαφής σταγόνας-σωματιδίου κάτω από διαφορετικές συνθήκες (DTP=0.31-1.28, We=8-80). Επιπλέον, καθορίστηκαν οι πιθανές εκβάσεις της κρούσης με βάση την ταχύτητα πρόσκρουσης και το μέγεθος του σωματιδίου. Τέλος εξήχθησαν συμπεράσματα σχετικά με την επιφάνεια επαφής κατά τη διάρκεια του φαινομένου που αφορούν τις μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης (FCC). Ένα από αυτά τα συμπεράσματα είναι ότι για μεγάλους λόγους DTP (>1) η επιφάνεια επαφής σε m^2 δεν αλλάζει πολύ με την ταχύτητα πρόσκρουσης. Συμπεραίνεται λοιπόν ότι το υπολογιστικό μοντέλο χρησιμοποιώντας τη μεθοδολογία διφασικής ροής VOF είναι στιβαρό και μπορεί να προσομοιώσει το φαινόμενο κρούσης μιας σταγόνας σε ένα στερεό σωματίδιο. Επόμενο βήμα αποτελεί η εισαγωγή στο μοντέλο της μεταφοράς μάζας και ενέργειας για την προσομοίωση του φαινομένου σε μη ισοθερμοκρασιακές ροές.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Bakshi, S., Roisman, I. V. and Tropea, C. (2007), Investigations on the impact of a drop onto a small spherical target, Physics of Fluids (1994-present) 19.

Bangonde, S., Nikure, P. and Buwa, V. V. (2009), Numerical Simulations of Dynamics of Drop Impact and Spreading on Cylindrical and Spherical Surfaces, Presented at GLS-9/8th World Congress of Chemical Engineering held at Montreal, Canada (August 23-27).

Brackbill, J. U., Kothe, D. B. and Zemach, C. (1992), A continuum method for modeling surface tension, Journal of Computational Physics 100**,** p.335-354.

Elias, R. N., Martins, M. A. and Coutinho, A. L. (2007), Simple finite element-based computation of distance functions in unstructured grids, International journal for numerical methods in engineering 72**,** p.1095-1110.

FLUENT 14.5 (2011), Theory Guide.

Gac, J. M. and Gradoń, L. (2014), Lattice-Boltzmann modeling of collisions between droplets and particles, Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 441**,** p.831-836.

Ge, Y. and Fan, L.-S. (2007), Droplet–particle collision mechanics with film-boiling evaporation, Journal of Fluid Mechanics 573**,** p.311-337.

Gunjal, P. R., Ranade, V. V. and Chaudhari, R. V. (2003), Experimental and computational study of liquid drop over flat and spherical surfaces, Catalysis Today 79–80**,** p.267-273.

Hardalupas, Y., Taylor, A. M. K. P. and Wilkins, J. H. (1999), Experimental investigation of sub-millimetre droplet impingement on to spherical surfaces, International Journal of Heat and Fluid Flow 20**,** p.477-485.

Hirt, C. W. and Nichols, B. D. (1981), Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, Journal of Computational Physics 39**,** p.201-225.

Levin, Z. and Hobbs, P. V. (1971), Splashing of Water Drops on Solid and Wetted Surfaces: Hydrodynamics and Charge Separation, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 269**,** p.555-585.

Mitra, S., Sathe, M. J., Doroodchi, E., Utikar, R., Shah, M. K., Pareek, V., Joshi, J. B. and Evans, G. M. (2013), Droplet impact dynamics on a spherical particle, Chemical Engineering Science 100**,** p.105-119.

Nikolopoulos, N., Theodorakakos, A. and Bergeles, G. (2005), Normal impingement of a droplet onto a wall film: a numerical investigation, International Journal of Heat and Fluid Flow 26**,** p.119-132.

Pasandideh-Fard, M., Bussmann, M. and Chandra, S. (2001), SIMULATING DROPLET IMPACT ON A SUBSTRATE OF ARBITRARY SHAPE, 11**,** p.397-414.

Strotos, G., Gavaises, M., Theodorakakos, A. and Bergeles, G. (2008), Numerical investigation on the evaporation of droplets depositing on heated surfaces at low Weber numbers, International Journal of Heat and Mass Transfer 51**,** p.1516-1529.

Theodorakakos, A. and Bergeles, G. (2004), Simulation of sharp gas–liquid interface using VOF method and adaptive grid local refinement around the interface, International Journal for Numerical Methods in Fluids 45**,** p.421-439.

Ubbink, O. 1997. Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces. Imperial College.

Droplet impingement onto a spherical particle using the Volume of Fluid Method (VOF)

Ilias Malgarinos[1,2,*], Nikolaos Nikolopoulos[1,2], Manolis Gavaises[1]
1: School of Engineering and Mathematical Sciences, City University London, Northampton Square, EC1V 0HB London, UK
2: Centre for Research and Technology Hellas, Chemical Process and Energy Resources Institute, Egialeias 52, Marousi, Athens, Gr-15125, Greece
Ilias Malgarinos, *Corresp. Author, PhD Candidate Dipl. Mechanical Engineer (Ilias.Malgarinos.1@city.ac.uk)
Nikolaos Nikolopoulos, Marie Curie Fellow, Senior Researcher CERTH/CPERI Mechanical Engineer (Nikolaos.Nikolopoulos.1@city.ac.uk, n.nikolopoulos@certh.gr)
Manolis Gavaises, Professor City University London (m.gavaises@city.ac.uk)

ABSTRACT

In this study the CFD results of a liquid droplet impinging onto a spherical particle are presented. This phenomenon appears in many technological applications, one of which is the FCC units/reactors (Fluid Catalytic Cracking) in refining industry. In these reactors, high molecular weight/heavy hydrocarbons (such as bitumen) are "cracked" in lighter products of higher technological value (such as gasoline). The Volume of Fluid Method (VOF) is used for the prediction of the isothermal fluid flow, as the two phases (gas-liquid) are immiscible. In all simulations executed the liquid phase is water and the gas phase is air, at room temperature, because for a starting point, the main scope of this work is the investigation of the main parameters affecting this phenomenon (liquid-solid contact), and not the physicochemical simulation of the "cracking" reaction. The spherical particle is represented by a wall boundary (plane), while a dynamic local grid refinement technique is also used. Overall, 9 cases are investigated with main parameters the Weber number ($=\rho u^2 D/\sigma$) varying from 8 to 80, and Droplet To Particle size ratio DTP, which range between 0.31 and 1.24. The possible outcomes of droplet-particle collisions are characterized based on the results of this parametric study.

Keywords: droplet, Volume of Fluid, impingement