



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Χημικών Μηχανικών

Τομέας Σύνθεσης και Ανάπτυξης Βιομηχανικών Διαδικασιών

Υπολογιστική μελέτη της κίνησης σωματιδίων σε διάταξη υδροδυναμικού εστιασμού

Διπλωματική Εργασία

Μαντζανάς Αλέξανδρος

Επιβλέποντες Καθηγητές:

Δημήτριος Χατζηαβραμίδης, Ομότιμος Καθηγητής ΕΜΠ

Ανδρέας Ανδρεόπουλος, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα 2020

Ευχαριστίες

Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή μου Δημήτριο Χατζηαβραμίδη για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με ένα τόσο ενδιαφέρον θέμα. Οι συμβουλές του και η καθοδήγησή του ήταν ανεκτίμητες για την ολοκλήρωση της διπλωματικής μου εργασίας. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή Ανδρέα Ανδρέοπουλο για το χρόνο που αφιέρωσε ώστε να ετοιμάσω να καταθέσω και να παρουσιάσω την παρούσα εργασία.

Ευχαριστώ οφείλω επίσης στον Δρ. Νικόλαο Δημητρίογλου για το χρόνο που αφιέρωσε ώστε να με βοηθήσει. Ήταν πάντα διαθέσιμος να απαντήσει στις ερωτήσεις μου και να με συμβουλευτεί. Συνάμα, χάρη στις κατευθύνσεις που μου έδωσε κατάφερα να αναπτύξω τη διπλωματική μου στο βαθμό που τα κατάφερα.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου στην υποστήριξη που μου παρείχαν ώστε να ασχοληθώ απερίσπαστος με τις σπουδές μου όλα αυτά τα χρόνια.

Περίληψη

Στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη της κίνησης σωματιδίων σε μία διάταξη υδροδυναμικού εστιασμού με άμεση αριθμητική προσομοίωση. Η τεχνολογία του υδροδυναμικού εστιασμού χρησιμοποιείται σε συσκευές κυτταρομετρίας με στόχο τον διαχωρισμό και την εστίαση κυττάρων. Προσφάτως, προτάθηκε ως σύστημα τροφοδοσίας σε μια συσκευή ενθυλάκωσης νησιδίων παγκρεατικών κυττάρων. Σύμφωνα με το σχεδιασμό της συσκευής, το πλάτος των καναλιών του συστήματος είναι συγκρίσιμο με τη μέση διάμετρο ενός ανθρώπινου νησιδίου. Σε σχέση με προηγούμενες υπολογιστικές μελέτες τα προς εστιασμό σωματίδια λαμβάνονται ρητά υπόψη, αφού η ροή επιλύεται ως μια διφασική ροή ρευστού-στερεών με τη μέθοδο του κινούμενου πλέγματος (ALE). Η προσέγγιση αυτή, που παρουσιάζεται για πρώτη φορά στη βιβλιογραφία, απ' όσο μπορούμε να γνωρίζουμε, πέραν του ότι παρέχει τη δυνατότητα του επακριβούς υπολογισμού των τροχιών των σωματιδίων, επιτρέπει να υπολογισθούν οι μεταξύ τους αποστάσεις. Τα νησίδια προσομοιώθηκαν ως κυκλικά και ελλειπτικά σωματίδια. Από την ανάλυση των αποτελεσμάτων, προκύπτει ότι ο εστιασμός και ο διαχωρισμός των σωματιδίων εξαρτώνται κυρίως από το λόγο των παροχών εισόδου.

Abstract

The aim of this thesis is to study the motion of particles in a direct numerical simulation hydrodynamic focusing apparatus. Hydrodynamic focusing technology is used in cytometry devices for the separation and focusing of cells. Recently, it has been proposed as a feed system to a pancreatic islet encapsulation device. According to the design of the device, the channel width of the system is comparable to the average diameter of a human islet. Compared to previous computational studies, the particles to be focused are explicitly taken into account, since the flow is solved as a two-phase fluid-solids flow by the ALE method. This approach, first introduced in the literature, to the best of our knowledge, in addition to providing the ability to accurately calculate the particle trajectories, allows for their distances to be calculated. The islets were simulated as circular and elliptical particles. The analysis of the results shows that the focusing and separation of the particles depend mainly on the ratio of the input flow rates.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή.....	1
1.1	Υδροδυναμικός εστιασμός.....	1
1.1.1	Εφαρμογές.....	2
1.2	Ανασκόπηση υπολογιστικών μεθόδων στη ροή ρευστού με σωματίδια.....	4
1.3	Σκοπός.....	6
2	Περιγραφή Μοντέλου.....	7
2.1	Φυσικό μοντέλο.....	7
2.1.1	Εκτίμηση μεγέθους και λόγου διαστάσεων παγκρεατικών νησιδίων.....	8
2.2	Μαθηματικό μοντέλο.....	11
2.3	Υπολογιστική μέθοδος.....	12
2.3.1	Περιγραφή της μεθόδου ALE.....	12
2.3.2	Επαλήθευση της υπολογιστικής μεθόδου.....	15
3	Αποτελέσματα και Συζήτηση.....	19
3.1	Αποτελέσματα για ένα σωματίδιο.....	19
3.1.1	Αποτελέσματα για κυκλικό σωματίδιο.....	19
3.1.2	Αποτελέσματα για ελλειπτικό σωματίδιο.....	21
3.2	Αποτελέσματα για πολλαπλά σωματίδια.....	26
3.2.1	Εστιασμός δύο σωματιδίων στον άξονα του αγωγού.....	26
3.2.2	Ταυτόχρονος διαχωρισμός και εστιασμός δύο σωματιδίων.....	28
3.2.3	Ταυτόχρονος διαχωρισμός και εστιασμός τεσσάρων σωματιδίων.....	30
4	Σύνοψη και Συμπεράσματα.....	35
5	Βιβλιογραφία.....	37

Σύμβολα Μοντέλου

Διανυσματικά Μεγέθη

g	Επιτάχυνση της Βαρύτητας
I	Ροπή Αδράνειας
n	Μοναδιαίο Διάνυσμα
r	Απόσταση του κάθε σημείου της διαμέτρου από το κέντρο του σωματιδίου
T	Ροπή
u	Ταχύτητα
u_{mesh}	Ταχύτητα Υπολογιστικού Πλέγματος
σ	Ολική Τάση

Λατινικά σύμβολα

<i>a</i>	Λόγος Διαστάσεων
<i>d</i>	Διάμετρος Σωματιδίου
<i>D</i>	Απόσταση Μεταξύ Σωματιδίων
<i>D*</i>	Αδιαστατοποιημένη Απόσταση
<i>h</i>	Μέγεθος του Υπολογιστικού Πλέγματος
<i>k</i>	Λόγος Ογκομετρικής Παροχής του Υγρού Θήκης προς του Υγρού Δείγματος
<i>k^e</i>	Αντίστροφος όγκος Πεπερασμένου Στοιχείου
<i>L</i>	Μήκος Αγωγού
<i>N</i>	Αριθμός Σωματιδίων
<i>p</i>	Πίεση
<i>R</i>	Χώρος Συντεταγμένων
<i>s</i>	Απόσταση επιφάνειας σωματιδίου-τοιχώματος αγωγού
<i>S</i>	Όριο Υπολογιστικού Χώρου
<i>t</i>	Χρόνος
<i>t*</i>	Αδιάστατος Χρόνος
<i>W</i>	Διάμετρος Αγωγού
<i>l</i>	Περίμετρος Σωματιδίου
<i>X</i>	Υλικές Συντεταγμένες
<i>x</i>	Θέση ως προς τον άξονα x
<i>y</i>	Θέση ως προς τον άξονα y

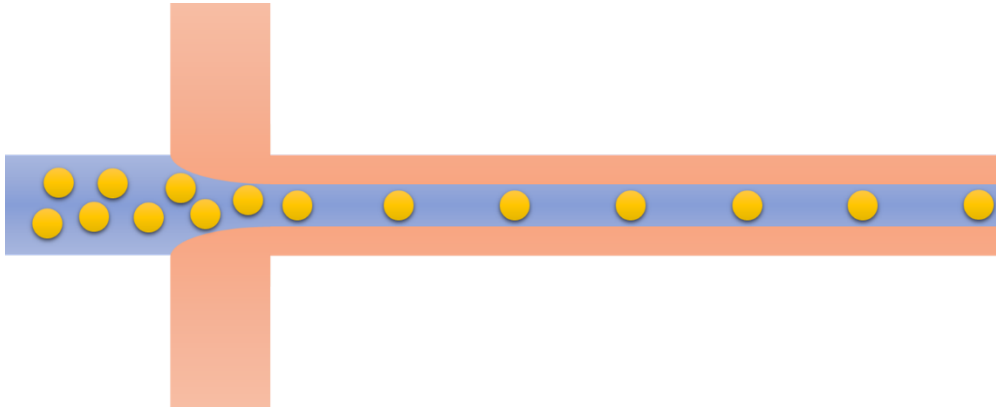
Ελληνικά σύμβολα

<i>a</i>	Λόγος Διαστάσεων
<i>β</i>	Λόγος Αποκλεισμού ($2W/d$)
<i>γ</i>	Λόγος Πυκνοτήτων ρ_p/ρ_f
<i>θ</i>	Γωνιακή Μετατόπιση
<i>λ</i>	Γραμμική Πυκνότητα
<i>μ</i>	Ιξώδες
<i>ρ</i>	Πυκνότητα
<i>χ</i>	Συντεταγμένες Αναφοράς
<i>ω</i>	Γωνιακή Ταχύτητα
<i>Ω</i>	Υπολογιστικός Χώρος

1 Εισαγωγή

1.1 Υδροδυναμικός εστιασμός

Υδροδυναμικός εστιασμός είναι η ευθυγράμμιση και ο διαχωρισμός σωματιδίων σε ένα ρέον υγρό. Το αργό υγρό πλέον θα ονομάζεται “υγρό δείγματος” και το ταχύ “υγρό θήκης”. Στο εξωτερικό ρέει το υγρό θήκης και στο εσωτερικό το υγρό δείγματος [1]. Μία σχηματική αναπαράσταση του υδροδυναμικού εστιασμού απεικονίζεται στην Εικόνα 1.1.

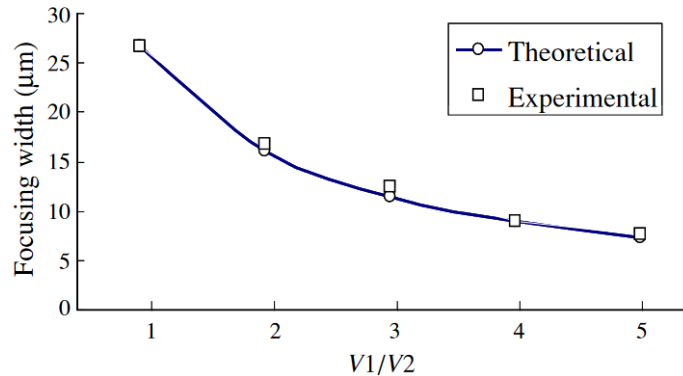


Εικόνα 1.1 Σχηματική αναπαράσταση του υδροδυναμικού εστιασμού. Με πορτοκαλί απεικονίζεται το υγρό θήκης, με μπλε το υγρό δείγματος και με κίτρινο τα σωματίδια.

Ο λόγος της ογκομετρικής παροχής των δύο ροών αποτελεί ένα σημαντικό παράγοντα στον υδροδυναμικό εστιασμό καθώς η περιοχή όπου τα δύο υγρά εφάπτονται μπορεί να προβλεφθεί από αυτόν. Πρέπει να σημειωθεί όμως ότι ο ακριβής προσδιορισμός του τελικού σχήματος της ροής είναι πιο δύσκολος. Η επιφάνεια αυτή και άρα και διάμετρος της ροής του υγρού θήκης μειώνεται με την αύξηση του λόγου της παροχής του υγρού θήκης προς την παροχή του υγρού δείγματος, k [2, 1, 3]. Η επίδραση των ταχυτήτων των ρευμάτων θήκης και δείγματος στην τελική διάμετρο του υγρού δείγματος μετά τον εστιασμό μπορεί να προβλεφθεί θεωρητικά. Η εξίσωση που διέπει τη σχέση αυτή είναι η εξής,

$$d = \frac{\rho_a D_4}{1.5 \left(\rho_1 \frac{u_{f1} D_1}{u_{f2} D_2} + \rho_2 + \rho_1 \frac{u_{f3} D_3}{u_{f2} D_2} \right)} \quad (1.1)$$

όπου d η διάμετρος του εστιασμένου ρεύματος, ρ_a η μέση πυκνότητα στην έξοδο, D_4 η διάμετρος της εξόδου, u_{f1} , u_{f2} , u_{f3} , οι ταχύτητες του ρευστού στους αγωγούς και D_1 , D_2 , D_3 οι διαμέτροι των αγωγών με το υγρό δείγματος(2) και με το υγρό θήκης (1,3). Στην Εικόνα 1 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της παραπάνω σχέσης σε σχέση με πειραματικά δεδομένα [3].



Εικόνα 1.2 Σύγκριση της σχέσης 1.1 με πειραματικά δεδομένα [3]

Σε περίπτωση που το υγρό δείγματος περιέχει σωματίδια αυτά θα διαταχθούν σε μία γραμμή στον άξονα του αγωγού, λόγω του υγρού θήκης [4]. Παράλληλα ο υδροδυναμικός εστιασμός μπορεί να επιτευχθεί σε δύο ή σε τρεις διαστάσεις. Στις δύο διαστάσεις το υγρό συμπιέζεται μόνο στην οριζόντια διεύθυνση. Έτσι το υγρό δείγματος μετατρέπεται σε ένα λεπτό φύλο υγρού. Αντίθετα στον τρισδιάστατο εστιασμό το υγρό δείγματος μπορεί να περιβληθεί πλήρως από το υγρό θήκης [5].

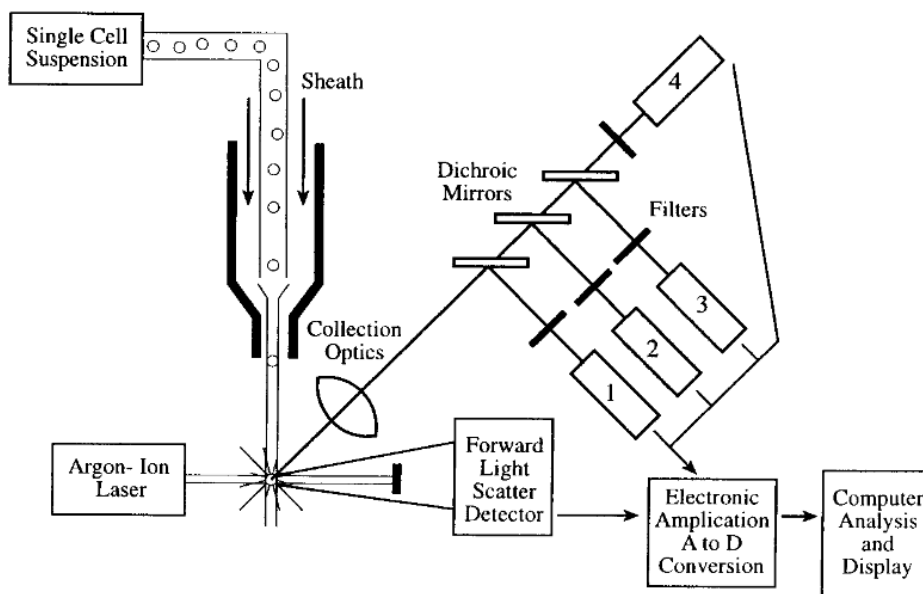
Πολλοί ερευνητές προσπαθούν να επιτύχουν τρισδιάστατο εστιασμό με συσκευή που η γεωμετρία της βρίσκεται σε ένα επίπεδο. Ο λόγος για την τάση αυτή είναι η μείωση του κόστους κατασκευής. Για το σκοπό αυτό μία λύση είναι μία συσκευή εστιασμού με δύο αντίρροπες καμπύλες στον αγωγό [5]. Οι Mao et al. αξιοποίησαν την περιστροφική ροή Dean για την επίτευξη του υδροδυναμικού εστιασμού στο ένα επίπεδο [6]. Μία άλλη προσέγγιση είναι η χρήση ενός αγωγού που περνάει μέσα από ένα θάλαμο διαστολής. Στην κορυφή του θαλάμου εισέρχεται το υγρό θήκης το οποίο εξαναγκάζει το υγρό δείγματος να εστιαστεί στον άξονα του αγωγού [4].

1.1.1 Εφαρμογές

Ο υδροδυναμικός εστιασμός εφαρμόζεται κυρίως στην κυτταρομετρία. Ο ρυθμός διέλευσης των κυττάρων κυμαίνεται σε εκατοντάδες ή ακόμα και χιλιάδες κύτταρα το δευτερόλεπτο. Στην κυτταρομετρία τα σωματίδια αφού εστιαστούν μέσω του υδροδυναμικού εστιασμού αναλύονται με τη χρήση οπτικών σημάτων. Όταν υπερβολικά πολλά κύτταρα περνούν από την περιοχή ανίχνευσης, ενδέχεται να υπερφορτώσουν τον ανιχνευτή με αποτέλεσμα να προκληθεί εμπλοκή σήματος. Η υδροδυναμική εστίαση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον διαχωρισμό των κυττάρων έτσι ώστε να επιτευχθεί καλύτερο σήμα όταν αυτά περνούν από τον ανιχνευτή [7].

Η κυτταρομετρία ροής μετράει πληθώρα χαρακτηριστικών των κυττάρων ή οποιονδήποτε άλλων σωματιδίων, συμπεριλαμβανομένων πυρήνων κυττάρων, μικροοργανισμών, χρωμοσωμάτων και χαντρών latex. Οι φυσικές ιδιότητες, όπως το μέγεθος (που αντιπροσωπεύεται από τη διασπορά του φωτός προς τα εμπρός) και η εσωτερική πολυπλοκότητα (που αντιπροσωπεύεται από τη διασπορά ορθής γωνίας) μπορούν να βρεθούν για ορισμένους κυτταρικούς πληθυσμούς. Οι φθορίζουσες χρωστικές ουσίες μπορούν να δεσμεύονται από διαφορετικά στοιχεία του κυττάρου όπως το DNA ή το RNA. Επιπλέον, αντισώματα που συζευγνύονται με φθορίζουσες βαφές μπορούν να δεσμεύσουν συγκεκριμένες πρωτεΐνες στις

κυτταρικές μεμβράνες ή στο εσωτερικό των κύτταρων. Όταν τα κύτταρα αυτά περνούν από μια πηγή φωτός, τα φθορίζοντα μόρια διεγείρονται σε μια υψηλότερη ενεργειακή κατάσταση. Με την επιστροφή στις καταστάσεις ανάπαυσής τους οι βαφές, εκπέμπουν φως σε υψηλότερα μήκη κύματος. Το εκπεμπόμενο φως διαδίδεται σε όλες τις κατευθύνσεις και συλλέγεται μέσω οπτικών συστημάτων που το κατευθύνουν σε μια σειρά φίλτρων και διχρωματικών καθρεφτών που απομονώνουν συγκεκριμένες ζώνες μήκους κύματος. Τα φωτεινά σήματα ανιχνεύονται από τους σωλήνες φωτοπολλαπλασιασμού και ψηφιοποιούνται για ανάλυση σε υπολογιστή [8, 9]. Η παραπάνω διαδικασία περιγράφεται στην Εικόνα 1.3.



Εικόνα 1.3 Σχηματική αναπαράσταση της κυτταρομετρίας ροής [9]

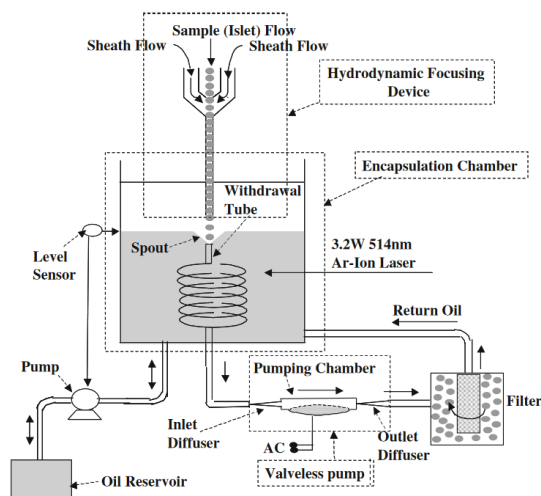
Παράλληλα εφαρμόζεται και στην σύνθεση νανοϋλικών. Τα κανάλια μέσα σε μία συσκευή εστιασμού έχουν μικρή διάμετρο. Αυτό έχει ως συνέπεια η ροή να είναι στρωτή, με αποτέλεσμα η ταχύτητα στον αγωγό να έχει παραβολικό προφίλ. Αυτό σημαίνει ότι κατά τη διεξαγωγή κάποιας αντίδρασης σε έναν αγωγό τα αντιδρώντα μέσα στο υγρό δεν θα αντιδράσουν για τον ίδιο χρόνο καθώς η ταχύτητα του ρευστού στα άκρα του αγωγού είναι πιο αργή. Αργή ταχύτητα συνεπάγεται και αυξημένο χρόνο παραμονής. Στην περίπτωση αυτή η χρήση του υδροδυναμικού εστιασμού μπορεί να βοηθήσει. Καθώς η ροή δείγματος θα συμπιεστεί στον άξονα του αγωγού η συγκέντρωση των αντιδρώντων θα είναι πιο ομοιόμορφη και ο χρόνος παραμονής ίδιος. Στην περίπτωση των νανοϋλικών αυτό είναι πολύ σημαντικό. Τα νανοϋλικά παρασκευάζονται συνήθως από τη συμπύκνωση των αντιδρώντων μέσα σε υγρά [10]. Η διαδικασία αυτή ξεκινά είτε με την αύξηση της συγκέντρωσης της διαλυμένης ουσίας ή με τη μείωση της διαλυτότητας. Οι παραπάνω παράγοντες καθορίζουν το μέγεθος των πυρήνων που δημιουργούνται [11]. Με τον υδροδυναμικό εστιασμό μπορούν να ελεγχθούν οι παράγοντες αυτοί μέσω της ρύθμισης των ροών εισόδου. Κατά συνέπεια

με τη χρήση του υδροδυναμικού εστιασμού μπορούν να παρασκευαστούν νανοϋλικά με πιο ομοιόμορφη κατανομή μεγεθών [12].

Ο υδροδυναμικός εστιασμός έχει παράλληλα εφαρμογές και στην ιατρική τεχνολογία. Οι Hatzianramidis et al. περιγράφουν στην ακόλουθη δημοσίευση μία συσκευή ενθυλάκωσης παγκρεατικών νησιδίων [13]. Η συσκευή αποτελείται από τα ακόλουθα μέρη:

- Ένα σύστημα που τροφοδοτεί τα νησίδια και ταυτόχρονα τα εστιάζει και τα διαχωρίζει με τη χρήση του υδροδυναμικού εστιασμού. Το σύστημα τροφοδοσίας διασφαλίζει ότι το κάθε νησίδιο θα ενθυλακωθεί ξεχωριστά.
- Ένας θάλαμος εγκλεισμού σε κάψουλα που περιέχει σύστημα δύο στρωμάτων νερού-ελαίου στο οποίο τα παγκρεατικά νησίδια ενθυλακώνονται.
- Μία μικρο-αντλία, που ωθεί τα νησίδια από τον θάλαμο εγκλεισμού προς ανάκτηση με διήθηση.

Τα παγκρεατικά νησίδια τοποθετούνται σε ένα διάλυμα πολυμερούς που περιέχει PEG (το διάλυμα περιέχει επίσης, φωτοκαταλύτη, επιταχυντή και συν-εκκινητή). Τροφοδοτούνται μέσω του εσωτερικού ακροφυσίου ενός συστήματος δύο ακροφυσίων. Τα σωματίδια διαχωρίζονται και ταυτόχρονα εστιάζονται λόγω του υδροδυναμικού εστιασμού. Σε αυτή την εφαρμογή του υδροδυναμικού εστιασμού το υγρό δείγματος είναι το διάλυμα που αναφέρθηκε προηγουμένως. Για υγρό θήκης χρησιμοποιείται επίσης το ίδιο διάλυμα χωρίς όμως τα νησίδια [13].



Εικόνα 1.4 Σχηματική αναπαράσταση της συσκευής που προτείνεται στην δημοσίευση των Hatzianramidis et al. [13]. Στην εικόνα περιγράφονται το σύστημα τροφοδοσίας, ο θάλαμος ενθυλάκωσης και η μικρο-αντλία.

1.2 Ανασκόπηση υπολογιστικών μεθόδων στη ροή ρευστού με σωματίδια

Πολλά μοντέλα υδροδυναμικού εστιασμού, παρόλο που περιγράφουν την κυτταρομετρία ροής αντιμετωπίζουν το υγρό δείγματος ως μία ενιαία φάση [2, 3, 4]. Υπάρχουν όμως και μοντέλα που αντιμετωπίζουν τα σωματίδια σαν διακριτές φάσεις. Οι Tripathi et al. χρησιμοποιούν το λογισμικό Ansys™ και τη μέθοδο DPM (Discrete particle Modeling) που περιέχει, για την μοντελοποίηση του υδροδυναμικού εστιασμού. Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιεί την προσέγγιση Euler-

Lagrange για την ταυτοποίηση της τροχιάς των σωματιδίων. Το λογισμικό στη συνέχεια ολοκληρώνει τις τάσεις που ασκούνται στα σωματίδια για να υπολογίσει το ισοζύγιο των υδροδυναμικών δυνάμεων που ασκούνται σε αυτά. Η μέθοδος αυτή εφαρμόστηκε όμως για σωματίδια πολύ μικρότερα του αγωγού [5]. Οι Zhang et al. έδειξαν ότι σωματίδια με πεπερασμένη διάμετρο σε σχέση με τον αγωγό μπορούν να εστιαστούν και να διαχωριστούν μέσα σε μία συσκευή υδροδυναμικού εστιασμού. Χρησιμοποίησαν μία πολυεπίπεδη μέθοδο πρόρρησης διόρθωσης για την επίλυση των εξισώσεων που διέπουν το πρόβλημα. Το σωματίδιο που μελετήθηκε όμως είχε πολύ μικρότερη διάμετρο σε σχέση με αυτή του αγωγού [7].

Για την περαιτέρω ανάπτυξη της παραπάνω συσκευής σημαντική είναι η μελέτη του πώς μεγαλύτερα σωματίδια, με συγκρίσιμη διάμετρο με τον αγωγό, συμπεριφέρονται κατά τον εστιασμό. Από την παραπάνω ανασκόπηση προκύπτει, ότι όσο μπορούμε να γνωρίζουμε δεν υπάρχει μία τέτοια προσέγγιση. Συνήθως κατά την μελέτη του υδροδυναμικού σχεδιασμού το υγρό δείγματος αντιμετωπίζεται ως ομογενές. Ακόμα και όταν τα σωματίδια είναι διακριτά το μέγεθός τους είναι πολύ μικρό ώστε να αλληλοεπιδράσουν με τα τοιχώματα του αγωγού. Κατά συνέπεια αναζητούνται επιπλέον τρόποι μοντελοποίησης της κίνησης σωματιδίων σε ρέοντα ρευστά από τη γενικότερη βιβλιογραφία.

Η μέθοδος ALE χρησιμοποιείται ευρύτατα για την μοντελοποίηση ροής σωματιδίων σε ρευστά. Η αρχή λειτουργίας της παρουσιάζεται αναλυτικά στο κεφάλαιο 2.3.1. Σημαντικό μειονέκτημα της μεθόδου είναι η απαίτηση αναδημιουργίας του πλέγματος για μεγάλες παραμορφώσεις. Παρόλα αυτά η μέθοδος έχει χρησιμοποιηθεί για την μοντελοποίηση 1000 σωματιδίων [14]. Παράλληλα οι Hu et al. μελέτησαν την καθίζηση κυκλικών και ελλειπτικών κυλίνδρων σε ένα δισδιάστατο κανάλι [15]. Λίγα χρόνια αργότερα, η κίνηση πολλών κυκλικών σωματιδίων προσομοιώθηκε επίσης από τον Hu [16]. Οι Feng et al. διερεύνησαν την αλληλεπίδραση σωματιδίων για διάφορα σενάρια κατά την καθίζησή τους [17], καθώς και την κίνηση ενός κυκλικού σωματιδίου στις ροές Poiseuille και Couette [6].

Μια άλλη προσέγγιση για την προσομοίωση ροών ρευστών με διεπιφάνιες σωματιδίων-υγρών είναι οι μέθοδοι φανταστικών πεδίων (FD). Σε μια μέθοδο FD, το πλέγμα είναι σταθερό σε όλο τον χώρο. Οι δυνάμεις μοντελοποιούνται με τέτοιο τρόπο ώστε το σωματίδιο να συμπεριφέρεται σαν να ήταν ένα άκαμπτο σώμα μέσα στην περιοχή του ρευστού. Οι μέθοδοι FD ταξινομούνται κατά το αν οι δυνάμεις εφαρμόζονται στην επιφάνεια των σωματιδίων ή σε όλο τον όγκο του σωματιδίου. Οι Glowinski et al. πρότειναν αρχικά μέθοδο FD με βάση έναν διανεμημένο πολλαπλασιαστή Lagrange (DLM) για ροή σωματιδίων σε ρευστό [18]. Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι ο πολύπλοκος χρονικά μεταβαλλόμενος χώρος να προσαρμοστεί σε ένα μεγαλύτερο, αλλά πιο απλό χώρο, τον πλασματικό χώρο, και να εφαρμοστούν σε αυτόν απλές οριακές συνθήκες. DLM-FD και παραλλαγές έχουν εφαρμοστεί για την προσομοίωση των ροών σωματιδίων-υγρών [18, 19].

Μία άλλη μέθοδος για την μοντελοποίηση της κίνησης σωματιδίων στα ρευστά είναι η lattice-Boltzmann (LBM) [20]. Η LBM χρησιμοποιεί απλοποιημένα μοντέλα για την κίνηση των σωματιδίων που βασίζονται σε μικροσκοπικές και μακροσκοπικές εξισώσεις. Κατά την επίλυση της μεθόδου αρχικά βρίσκονται οι υδροδυναμικές δυνάμεις που ασκούνται, με βάση τις προαναφερθείσες σχέσεις. Στη συνέχεια με τη χρήση του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα, υπολογίζεται η τροχιά των σωματιδίων. Στην LBM, το πλέγμα δεν προσαρμόζεται στην κίνηση του σωματιδίου με αποτέλεσμα να εξαλείφεται η ανάγκη για την αναδημιουργία του. Με αυτό τον τρόπο το υπολογιστικό κόστος μειώνεται και η μέθοδος μπορεί να προσομοιάσει πολλά σωματίδια [21]. Εμπειρικές σχέσεις δυνάμεων όπως η δύναμη λίπανσης [22] και η δύναμη ελατηρίου [23] είναι απαραίτητες για την

μοντελοποίηση ροών με σωματίδια. Οι Xia et al., χρησιμοποίησαν τη μέθοδο αυτή για τη μοντελοποίηση της καθίζησης ελλειπτικών σωματιδίων δύο διαστάσεων [24].

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η μέθοδος LBM, έχει το μειονέκτημα να βασίζεται σε τεχνητές δυνάμεις. Οι δυνάμεις αυτές χρειάζονται όταν το σωματίδιο είναι κοντά σε κάποια άλλη επιφάνεια. Αντίθετα η μέθοδος ALE, με την αναδημιουργία του πλέγματος μπορεί να αναπαραστήσει με λεπτομέρεια την περιοχή γύρω από τα σωματίδια την κάθε χρονική στιγμή. Κατά συνέπεια με τη μέθοδο ALE δεν απαιτείται χρήση εμπειρικών σχέσεων. Το μειονέκτημα είναι όμως το αυξημένο υπολογιστικό κόστος [24]. Στα πλαίσια αυτής της εργασίας επιλέχθηκε η μέθοδος ALE, διότι η αλληλεπίδραση μεταξύ των τοιχωμάτων του αγωγού και των σωματιδίων αποτελούν το κίνητρο για την μελέτη που διεξάχθηκε.

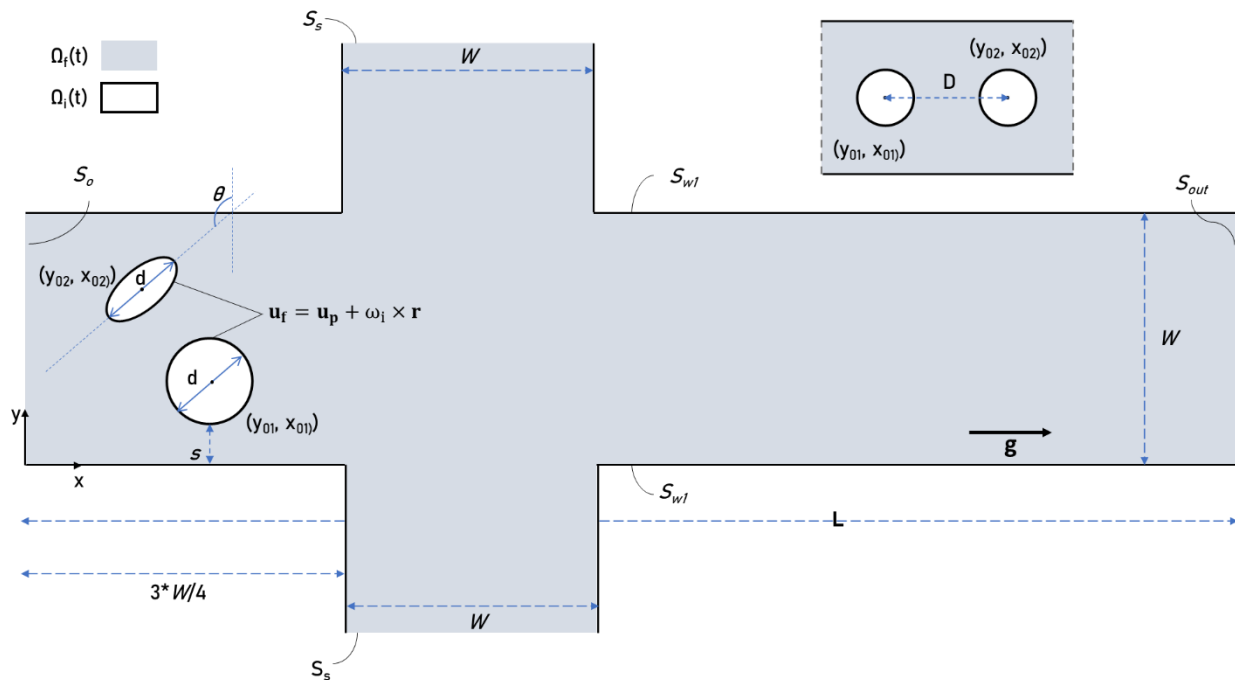
1.3 Σκοπός

Σκοπός της παρούσης εργασίας είναι η μελέτη της κίνησης σωματιδίων που τροφοδοτούνται στον εσωτερικό αγωγό διάταξης υδροδυναμικού εστιασμού ροής. Για το σκοπό αυτό κατασκευάζονται υπολογιστικά μοντέλα και μελετάται η κίνηση και ο εστιασμός ενός σωματιδίου με διάμετρο συγκρίσιμη προς τη διάμετρο του αγωγού. Επίσης μελετάται ο εστιασμός και ο διαχωρισμός δύο ή περισσότερων σωματιδίων στην ίδια διάταξη. Αυτές οι μελέτες γίνονται με προσομοιώσεις που αναδεικνύουν την επίδραση της μορφολογίας των σωματιδίων (κυκλική και ελλειψοειδής) και του λόγου ρυθμών ροής υγρών θήκης και δείγματος στον εστιασμό και διαχωρισμό σωματιδίων. Τα αποτελέσματα αυτών των προσομοιώσεων χρησιμεύουν για το σχεδιασμό διατάξεων υδροδυναμικού εστιασμού για σωματίδια που μας ενδιαφέρουν.

2 Περιγραφή Μοντέλου

2.1 Φυσικό μοντέλο

Η γεωμετρία που εξετάζεται αποτελείται από μία κάθετη διασταύρωση καναλιών σε σχήμα σταυρού. Σχήμα της γεωμετρίας αυτής φαίνεται στην Εικόνα 2.1. Το πλάτος και το μήκος του αγωγού είναι $W=1.2\text{ cm}$ και $L=12*W$ αντίστοιχα. Το υγρό έχει πυκνότητα $\rho_f=1000\text{ g/ml}$ και ιξώδες $\mu=0.01\text{ Pa}\cdot\text{s}$. Το ρευστό εισέρχεται με ταχύτητα u_0 και ku_0 από τα όρια S_o και S_{out} αντίστοιχα. Οι τιμές του k κυμαίνονται από 1-10. Ο κύριος αγωγός περιέχει είτε κυκλικά είτε ελλειπτικά σωματίδια. Η διάμετρος των σωματιδίων είναι d ενώ ο λόγος της μικρής προς την μεγάλη διάμετρο της έλλειψης είναι a . Ο λόγος αποκλεισμού των σωματιδίων ορίζεται ως ο λόγος του πλάτους του αγωγού W προς την ακτίνα ενός σωματιδίου $\beta=2*W/d$. Οι λόγοι της πυκνότητας των σωματιδίων προς την πυκνότητα του υγρού που εξετάζονται σε αυτή την εργασία είναι $\gamma=1.059$ & $\gamma=1.250$. Σύμφωνα με μία ανάλυση εικόνων που έγινε με τη χρήση MATLAB™ η διάμετρος των παγκρεατικών νησιδίων, d κυμαίνεται από 50-600 μm και ο λόγος διαστάσεων a από 1-2.7 [Κεφάλαιο 3.1.1]. Στα πλαίσια αυτής της μελέτης το a κυμαίνεται από 1-3.5 και το β από 4.5-10.5. Σε αυτές τις τιμές του β , η διάμετρος του σωματιδίου είναι συγκρίσιμη με το πλάτος του αγωγού, και άρα η αλληλεπίδραση μεταξύ των τοιχωμάτων του αγωγού και του σωματιδίου επηρεάζει την κίνησή του. Η αρχική θέση του κάθε σωματιδίου i ονομάζεται (x_{0i}, y_{0i}) . Οι αρχικές θέσεις των σωματιδίων είναι αρκετά μακριά από το σύνορο S_o , ώστε η ροή του ρευστού να είναι πάντα πλήρως ανεπτυγμένη. Τόσο το ρευστό όσο και τα σωματίδια την στιγμή $t=0$ βρίσκονται σε ηρεμία. Στο μοντέλο τα σωματίδια θεωρούνται ως άκαμπτα.



Εικόνα 2.1 Σχηματική αναπαράσταση του χώρου του προβλήματος.

2.1.1 Εκτίμηση μεγέθους και λόγου διαστάσεων παγκρεατικών νησιδίων

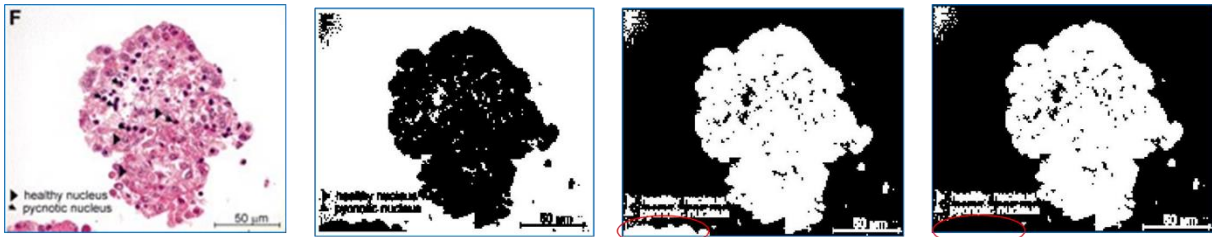
Σκοπός της συγκεκριμένης ενότητας είναι η εκτίμηση του μεγέθους και του λόγου διαστάσεων α παγκρεατικών νησιδίων. Θέλουμε να εξετάσουμε εάν οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν στο υπολογιστικό μοντέλο είναι συναφείς με την πραγματικότητα. Για την ανάλυση που διεξάχθηκε, αρχικά έγινε συλλογή εικόνων από διάφορα επιστημονικά περιοδικά [25, 26, 27, 28, 29]. Οι εικόνες αναλύθηκαν με την εργαλειοθήκη ανάλυσης εικόνων του MATLAB™. Μια εικόνα αντιπροσωπεύεται από έναν πίνακα με αριθμό γραμμών και στηλών που αντιστοιχούν στα pixel στην κάθε διάσταση x , y . Σε κάθε σημείο (x_i, y_j) αντιστοιχεί ένα διάνυσμα (R, G, B) που αντιπροσωπεύει την ένταση του κάθε χρώματος (Red, Blue, Green) από 0-255. Μία σχηματική αναπαράσταση μιας εικόνας RGB φαίνεται στην Εικόνα 2.2.

	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)
7	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)
6	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)
5	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)
4	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)
3	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)
2	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)
1	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)	(R,G,B)
y/x	1	2	3	4	5	6	7	8	9	8

(R,G,B)	0-255
	Συντεταγμένες Pixel

Εικόνα 2.2 Σχηματική αναπαράσταση μιας εικόνας RGB

Ο κώδικας που χρησιμοποιήθηκε λειτουργεί με τον ακόλουθο τρόπο. Ο χρήστης πρέπει σε πρώτο στάδιο να εντοπίσει οπτικά τον αριθμό των σωματιδίων στην εικόνα. Στη συνέχεια η εικόνα μετατρέπεται από πολύχρωμη (R G B) σε δυαδική. Τονίζεται ότι με τον όρο δυαδική, εννοείται ότι η εικόνα έχει αυστηρά ένα χρώμα σε κάθε σημείο της (x_i, y_j) , είτε μαύρο (0) είτε άσπρο (1). Το MATLAB™ περιλαμβάνει συνάρτηση που εντοπίζει τη μεγάλη και τη μικρή διάμετρο των λευκών περιοχών τις εικόνας. Το πρόβλημα είναι ότι το μέγεθος εκφράζεται με τα pixels της εικόνας. Για τη μετατροπή του σε μη πρέπει να βρεθεί αρχικά το μήκος της μπάρας (οι εικόνες έχουν μία μπάρα που αντιπροσωπεύει ένα γνωστό μήκος) σε pixels. Στις περισσότερες περιπτώσεις η μπάρα έχει σημαντικά διαφορετικό χρώμα από το φόντο της εικόνας. Κατά συνέπεια η μπάρα αρχίζει και τελειώνει σε ένα σημείο όπου η διαφορά της τιμής κάποιου χρώματος, έστω $(R=0-255)$, από σημείο σε σημείο είναι μεγάλη. Υπολογίζοντας τη διαφορά στην τιμή του R για τα σημεία που βρίσκονται στο ίδιο ύψος ($y=const$) με την μπάρα μπορούμε να βρούμε πότε η διαφορά ξεπερνά ένα όριο. Όταν συμβεί αυτό δυο διαδοχικές φορές η διαφορά των δύο αυτών θέσεων ορίζεται ως το μήκος της μπάρας σε pixels. Στην Εικόνα 2.3, παρουσιάζεται η παραπάνω διαδικασία για μία εικόνα παγκρεατικού νησιδίου.

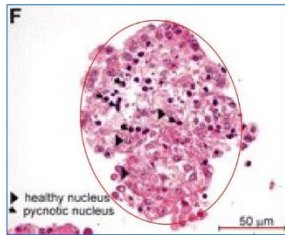


Βήμα 1: Οπτική ταυτοποίηση του αριθμού των νησιδίων που θα ανιχνευθούν. Στην περίπτωση αυτή επιλέγεται 1.

Βήμα 2: Μετατροπή της εικόνας σε ασπρόμαυρη με βάση το επίπεδο έντασης του χρώματος σε κάθε σημείο (η τιμή επιλέγεται από το χρήστη). Η εικόνα έχει μόνο δύο χρώματα, άσπρο(1) και μαύρο(0).

Βήμα 3: Αντιστροφή των δύο χρωμάτων. Η συνάρτηση του matlab χρειάζεται τις περιοχές προς ανίχνευση σε άσπρο χρώμα και το φόντο σε μαύρο χρώμα. Το βήμα αυτό δεν είναι πάντα απαραίτητο.

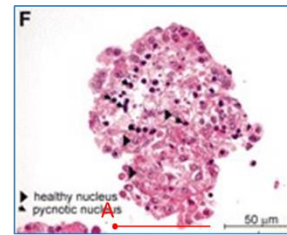
Βήμα 4: Απομάκρυνση των σωματιδίων όπου αυτά τέμνουν το περιθώριο της εικόνας.



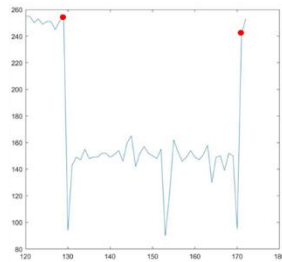
Βήμα 5: Εύρεση των ελλείψεων που προσεγγίζουν καλύτερα τις λευκές περιοχές από τη προηγούμενη εικόνα.

a	1.26
d	123 pixels

Βήμα 6: Εύρεση των απαραίτητων στοιχείων που χρειάζονται για τη μελέτη. Και αυτά τα δίνει η προηγούμενη συνάρτηση.



Βήμα 7: Μετατροπή των pixels σε μm. Από την εικόνα φαίνεται ότι το μήκος της μαύρης μπάρας είναι 50 μm. Για να βρεθεί το μήκος της σε pixels αρχικά επιλέγεται ένα σημείο Α στο ίδιο ύψος με τη μπάρα. Στη συνέχεια αποθηκεύονται οι τιμές ενός χρώματος από τα R, G, B που βρίσκονται σε μία γραμμή που περιέχει τη μαύρη μπάρα από το Α έως το όριο της εικόνας.



Βήμα 8: Εύρεση των διαφορών τις τιμές ενός χρώματος (R, στην περίπτωση μας) στα διαδοχικά pixels, ξεκινώντας από το Α. Κάθε φορά που η διαφορά ξεπερνά ένα ποσοστό αποθηκεύουμε τη θέση του pixel. Επιλέγοντας κατάλληλο αρχικό σημείο και ποσοστό η διαφορά θα ξεπεράσει το όριο μόνο στην αρχή και το τέλος της μαύρης μπάρας.

a	1.26
d	154.47 μm

Βήμα 9: Γνωρίζοντας τις θέσεις των pixels στα άκρα της μαύρης μπάρας ευκολά βρίσκεται το μήκος της σε pixels, ώστε μετά να γίνει η μετατροπή των pixels σε μm.

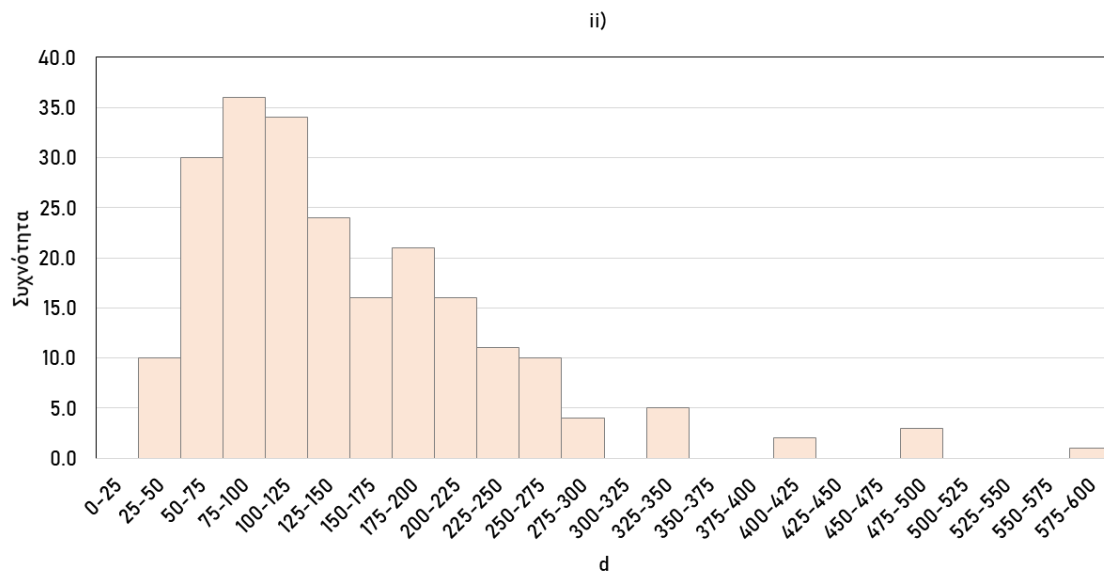
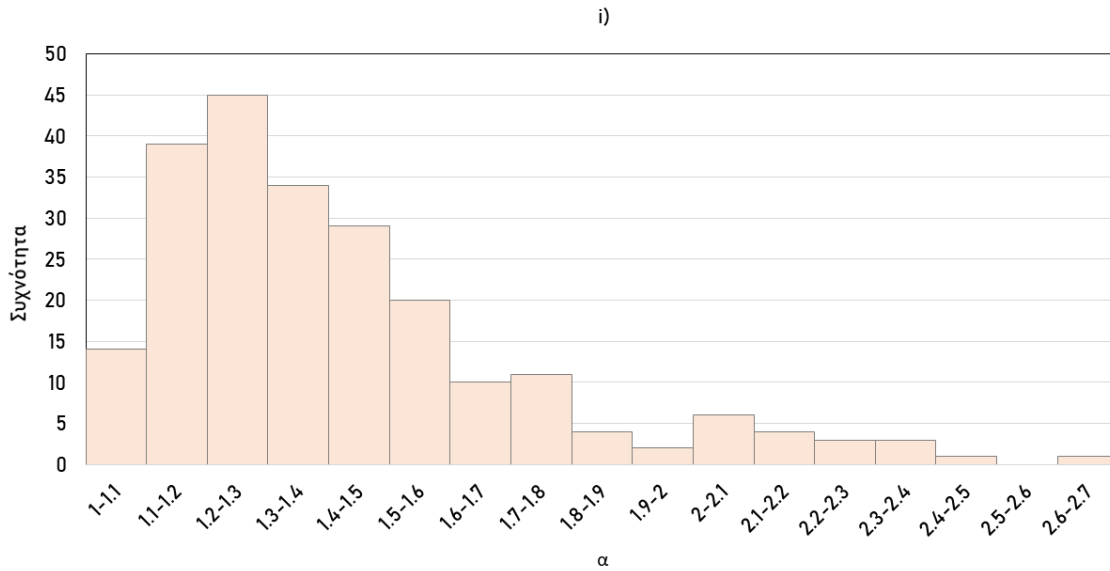
Εικόνα 2.3 Εύρεση του a και του d για ένα ελλειπτικό σωματίδιο.

Τα αποτελέσματα της ανάλυσης 226 σωματιδίων παρουσιάζονται με ορισμένα περιγραφικά χαρακτηριστικά στον Πίνακα 2.1. Στο Εικόνα 2.4 συχνοτήτων για το i) d και το ii) a . Βλέπουμε ότι ο μέσος επηρεάζεται από τις υψηλές ακραίες τιμές και στα δύο μεγέθη. Κατά συνέπεια η διάμεσος χαρακτηρίζει καλύτερα το δείγμα.

Πίνακας 2.1: Περιγραφικά Στατιστικά του δείγματος

	a	d
Μέσος	1.42	148.07
Τυπική απόκλιση	0.30	89.18
Μέγιστο	2.66	592.59

Ελάχιστο	1.02	26.22
Εύρος	1.6	462.6
Διάμεσος	1.3	124.7



Εικόνα 2.4 Συχνότητες για i) το α ii) τη διάμετρο d

2.2 Μαθηματικό μοντέλο

Το μοντέλο που αναπτύσσεται σε αυτή την εργασία είναι δύο διαστάσεων. Περιλαμβάνει δύο φάσεις, αυτή του Νευτωνικού ρευστού και αυτή των σωματιδίων. Το ρευστό καταλαμβάνει το πεδίο $\Omega_f(t)$, για κάθε χρονική στιγμή $t \geq 0$, ενώ αντίστοιχα ένα σωματίδιο i , όπου $i = 1, 2, \dots, N$ με N τον αριθμό των σωματιδίων καταλαμβάνει το πεδίο $\Omega_i(t)$. Κατά συνέπεια το εσωτερικό του $\Omega_i(t)$ δεν χρειάζεται να μοντελοποιηθεί. Υπολογίζονται μόνο οι δυνάμεις και οι ροπές που ασκούνται στο όριο του $\Omega_i(t)$ με το $\Omega_f(t)$ και οι εξωτερικές δυνάμεις (η βαρύτητα). Σε αυτό το σημείο πρέπει να τονιστεί ότι οι δυνάμεις και οι ροπές υπολογίζονται χωρίς τη χρήση εμπειρικών σχέσεων. Στη συνέχεια, γνωρίζοντας τα παραπάνω, υπολογίζεται η μεταφορική ταχύτητα του σωματιδίου i , \mathbf{u}_{pi} και η περιστροφική του ταχύτητα ω_i .

Η σύζευξη της κίνησης του σωματιδίου με αυτή του ρευστού γίνεται με τη συνθήκη μη ολίσθησης. Γνωρίζοντας τις ταχύτητες του σωματιδίου, εύκολα υπολογίζεται η ταχύτητα του κάθε σημείου της περιφέρειάς του, η οποία όμως είναι η ίδια με αυτή του ρευστού στο ίδιο σημείο λόγω της συνθήκης μη ολίσθησης.

Οι εξισώσεις που διέπουν το $\Omega_f(t)$ είναι οι ακόλουθες:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_f = 0 \quad (2.1)$$

$$\rho_f \frac{D\mathbf{u}_f}{Dt} = \rho_f \mathbf{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.2)$$

όπου \mathbf{u}_f η ταχύτητα του ρευστού, \mathbf{f} ο λόγος της δύναμης όγκου προς τη μάζα και $\boldsymbol{\sigma}$ ο τελεστής τάσης ο οποίος ορίζεται ως:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T], \quad (2.3)$$

όπου p η πίεση. Η μεταφορική ταχύτητα του σωματιδίου \mathbf{u}_p δίνεται από τον ακόλουθο τύπο:

$$\lambda_i \frac{d\mathbf{u}_{pi}}{dt} = (\lambda_i - \lambda_f)\mathbf{g} - \int \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dl, \quad (2.4)$$

όπου λ_i και λ_f οι πυκνότητες (kg/m) του σωματιδίου i και του ρευστού και \mathbf{g} (9.81m/s) η επιτάχυνση της βαρύτητας, \mathbf{n} μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στην επιφάνεια του σωματιδίου και l είναι η περίμετρος του σωματιδίου. Το ολοκλήρωμα αντιπροσωπεύει τη δύναμη που ασκεί το ρευστό πάνω στο σωματίδιο. Η περιστροφική κίνηση του σωματιδίου περιγράφεται με τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{I}_i\omega_i) = \mathbf{T}_i \quad (2.5)$$

$$\mathbf{T}_i = - \int \mathbf{r} \times (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) dl, \quad (2.6)$$

όπου \mathbf{I}_i η ροπή αδράνειας και \mathbf{T}_i η ροπή του σωματιδίου i και \mathbf{r} η απόσταση του κάθε σημείου της l από το κέντρο του σωματιδίου.

Στη συνέχεια ακολουθεί η παρουσίαση των συνοριακών συνθηκών. Αυτές περιλαμβάνουν τη συνθήκη μη ολίσθησης η οποία έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\mathbf{u}_f = 0 \quad (2.7)$$

για τα τοιχώματα του αγωγού S_{w1} και S_{w1} ,

$$\mathbf{u}_f = \mathbf{u} + \omega_i \times \mathbf{r}, \quad x \in S \quad (2.8)$$

για τη περίμετρο του σωματιδίου κάθε χρονική στιγμή. Με \mathbf{r} συμβολίζεται η απόσταση κάποιου σημείου της περιμέτρου από το κέντρο του σωματιδίου Παράλληλα στις εισόδους των αγωγών S_o και S_s η ταχύτητα είναι σταθερή.

$$\mathbf{u}_f = \mathbf{u}_o \quad (2.9)$$

και

$$\mathbf{u}_f = k\mathbf{u}_o \quad (2.10)$$

Για την έξοδο του αγωγού S_{out} ισχύει η συνθήκη του ανοιχτού συνόρου:

$$\sigma \mathbf{n} = 0 \quad (2.11)$$

2.3 Υπολογιστική μέθοδος

Οι παραπάνω εξισώσεις επιλύθηκαν με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Για να μοντελοποιηθεί η μεταβολή αυτή του πεδίου του ρευστού $\Omega_f(t)$ καθώς τα σωματίδια κινούνται στο χώρο, χρησιμοποιείται μια αυθαίρετη τεχνική Lagrangian-Eulerian (ALE). Η κίνηση των σωματιδίων προκαλεί παραμορφώσεις στο πλέγμα. Κατά συνέπεια αναδημιουργείται ανά τακτά χρονικά διαστήματα. Για την επίλυση του προβλήματος επιλέχθηκε ελεύθερο τριγωνικό πλέγμα μεγέθους h . Το h επιλέγεται μικραίνοντας την τιμή του, μέχρι η λύση της προσομοίωσης να μην μεταβάλλεται. Καθώς τα σωματίδια $\Omega_i(t)$ κινούνται ελεύθερα στο ρευστό, το πεδίο που καταλαμβάνεται από το υγρό $\Omega_f(t)$ κάθε χρονική είναι μεταβλητό.

2.3.1 Περιγραφή της μεθόδου ALE

Οι αλγόριθμοι Lagrange θεωρούν ότι ο κάθε μεμονωμένος κόμβος του υπολογιστικού πλέγματος ακολουθεί τα υλικά σωματίδια κατά τη διάρκεια της κίνησής τους. Η Lagrangian περιγραφή επιτρέπει την εύκολη περιγραφή της κίνησης ελεύθερων επιφανειών και διεπιφανειών μεταξύ διαφορετικών υλικών. Η αδυναμία της, είναι η ανικανότητά της να ακολουθεί μεγάλες

παραμορφώσεις του υπολογιστικού πλέγματος χωρίς προσφυγή σε συχνή αναδημιουργία του. Στην θεώρηση Lagrange, ένα σημείο στο χώρο χαρακτηρίζεται από τις υλικές του συντεταγμένες X . Οι συντεταγμένες αυτές ορίζουν την διάταξη αναφοράς R_x . Η σχέση μεταξύ του χωρικού και υλικού συστήματος συντεταγμένων δίνεται από την ακόλουθη σχέση,

$$\begin{aligned}\varphi(X, t) &= (x, t) \\ x &= x(X, t) \\ \mathbf{u}(X, t) &= \frac{\partial x}{\partial t}\end{aligned}\tag{2.12}$$

όπου φ μια αντιστοίχιση μεταξύ των R_x και R_x και \mathbf{u} η ταχύτητα. Το φ αντιπροσωπεύει την τροχιά των σωματιδίων στο χώρο

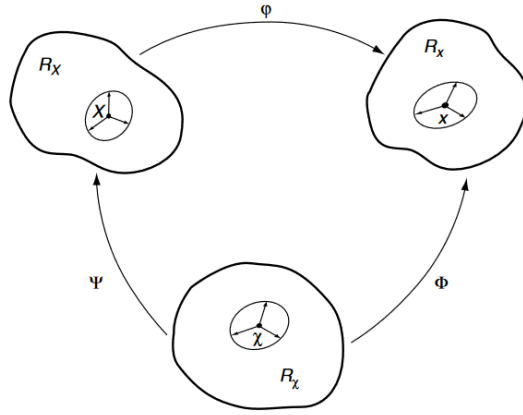
Οι αλγόριθμοι Euler χρησιμοποιούνται ευρέως στη δυναμική των ρευστών. Το υπολογιστικό πλέγμα είναι σταθερό στο χώρο και η συνεχής φάση μετακινείται σε σχέση με αυτό. Στην περιγραφή Euler, οι μεγάλες παραμορφώσεις στην κίνηση του συνεχούς μέσου μπορούν να αντιμετωπιστούν με σχετική ευκολία. Χάνεται όμως ο εύκολος ορισμός των διεπιφανειών και η ανάλυση των λεπτομερειών της ροής. Οι εξισώσεις στην θεώρηση αυτή εκφράζονται με βάση τις χωρικές συντεταγμένες x και το χρόνο t . Η ταχύτητα \mathbf{u} επίσης είναι συνάρτηση μόνο των χωρικών συντεταγμένων x και του χρόνου t .

$$\mathbf{u} = u(x, t)\tag{2.13}$$

Συνάμα, οι όροι διάχυσης που προκύπτουν λόγω της σχετικής κίνησης του συνεχούς μέσου σε σχέση με το υπολογιστικό πλέγμα προκαλούν δυσκολίες στους υπολογισμούς

Η αυθαίρετη Lagrangian - Eulerian (ALE) περιγραφή, συνδυάζει τα πλεονεκτήματα των παραπάνω δύο παραπάνω κλασικών κινηματικών περιγραφών, ελαχιστοποιώντας παράλληλα τα αντίστοιχα μειονεκτήματά τους. Στην περιγραφή ALE, οι κόμβοι του υπολογιστικού πλέγματος μπορούν να μετακινηθούν με το συνεχές μέσο όπως στην περιγραφή Lagrange, να διατηρηθούν σταθεροί σύμφωνα με την περιγραφή Euler, ή ακόμα και να κινηθούν με κάποιο αυθαίρετα ορισμένο τρόπο. Η ικανότητα αυτή προσδίδει στην μέθοδο αυξημένη ακρίβεια και ευελιξία. Λόγω αυτής της ελευθερίας στη μετακίνηση του υπολογιστικού πλέγματος επιτρέπονται μεγαλύτερες παραμορφώσεις του συνεχούς μέσου σε σχέση με μια καθαρώς Lagrangian μέθοδο. Συνάμα, η ευκρίνεια της μεθόδου είναι καλύτερη από εκείνη που παρέχεται από μια καθαρά Eulerian προσέγγιση.

Η μέθοδος ALE χρησιμοποιεί τον χώρο αναφοράς R_χ και όχι τους R_x και R_x . Οι χ είναι οι συντεταγμένες ως προς το R_χ . Το R_χ μετατρέπεται στις υλικές και χωρικές συντεταγμένες με τη χρήση των Ψ και Φ αντίστοιχα. Οι σχέσεις μεταξύ των παραπάνω συστημάτων αναφοράς παρουσιάζονται στην Εικόνα 2.5.



Εικόνα 2.5 Σχέση μεταξύ των συστημάτων αναφοράς [30]

Οι τρεις αντιστοιχίσεις συνδέονται με τη σχέση

$$\varphi = \Phi(\Psi^{-1}) \quad (2.14)$$

Η αντιστοιχίση Φ αντιπροσωπεύει την κίνηση των κόμβων του πλέγματος [30]. Η ταχύτητα του πλέγματος δίνεται από την εξίσωση,

$$\mathbf{u}_{mesh}(\chi, t) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \quad (2.15)$$

Η υλική παράγωγος της ταχύτητας για τη μέθοδο ALE δίνεται από την ακόλουθη σχέση.

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{d\mathbf{u}}{dt} + (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{mesh})\nabla\mathbf{u} \quad (2.16)$$

Όταν το \mathbf{x} ταυτίζεται με το χ η ταχύτητα \mathbf{u}_{mesh} είναι 0 όπως φαίνεται από την εξίσωση 2.15. Η υλική παράγωγος τότε μετατρέπεται στην Eulerian μορφή. Όταν η ταχύτητα είναι η ίδια σε κάποιο σημείο με αυτή του πλέγματος η 2.16 μετατρέπεται στην Lagrangian μορφή, καθώς ο όρος διάχυσης απαλείφεται. Γενικά, η ταχύτητα πλέγματος \mathbf{u}_{mesh} μεταβάλλεται ελεύθερα στο εσωτερικό του πλέγματος. Περιορίζεται μόνο στα όρια του χώρου που καταλαμβάνει το ρευστό [31].

Η εφαρμογή της μεθόδου ALE σε υπολογιστή απαιτεί τη διαμόρφωση μιας διαδικασίας ενημέρωσης πλέγματος που υπολογίζει τις ταχύτητες ή τις μετατοπίσεις στους κόμβους του πλέγματος. Η ομογενοποίηση του πλέγματος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να διατηρηθεί το υπολογιστικό πλέγμα όσο πιο ομοιόμορφο είναι δυνατόν και για να αποφευχθεί η αναστροφή κάποιου στοιχείου του κατά τη διάρκεια της επίλυσης του μοντέλου. Η ομογενοποίηση του

πλέγματος απαιτεί την ενημέρωση των συντεταγμένων των κόμβων σε κάθε στάδιο της υπολογιστικής διαδικασίας. Η ενημέρωση γίνεται από την τρέχουσα ταχύτητα του πλέγματος κάθε χρονική στιγμή ή από τη βηματική μετατόπιση του πλέγματος. Στη αλληλεπίδραση ρευστού-υγρού οι κινούμενες επιφάνειες (αυτές του στερεού) αντιμετωπίζονται με τη μέθοδο Lagrange, ενώ το εσωτερικό του υπολογιστικού πλέγματος (ο χώρος που καταλαμβάνει το υγρό) με τη μέθοδο Euler. Στο εσωτερικό του πεδίου η ταχύτητα του πλέγματος υπολογίζεται με παρεμβολή, αφού ο τρόπος κίνησης των ορίων είναι γνωστός [30]. Η μέθοδος παρεμβολής που χρησιμοποιείται στα πλαίσια αυτής της εργασίας περιγράφεται παρακάτω.

Η κίνηση του πλέγματος στο εσωτερικό του υγρού μπορεί να θεωρηθεί ότι ικανοποιεί μια ελλειπτική μερική διαφορική εξίσωση, όπως η εξίσωση Laplace, που εξασφαλίζει την ομαλή διακύμανσή του. Μία τέτοια εξίσωση είναι η ακόλουθη,

$$\nabla \cdot (k^e \nabla \mathbf{u}_{\text{mesh}}) = 0 \quad (2.17)$$

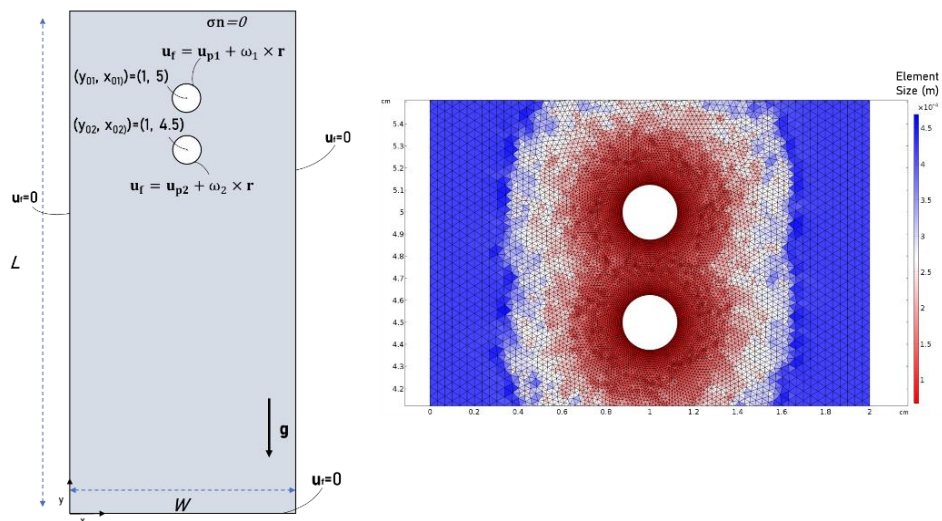
όπου \mathbf{u}_{mesh} η ταχύτητα του πλέγματος και k^e ο αντίστροφος όγκος του τοπικού στοιχείου [31].

2.3.2 Επαλήθευση της υπολογιστικής μεθόδου

2.3.2.1 Κυκλικό σωματίδιο

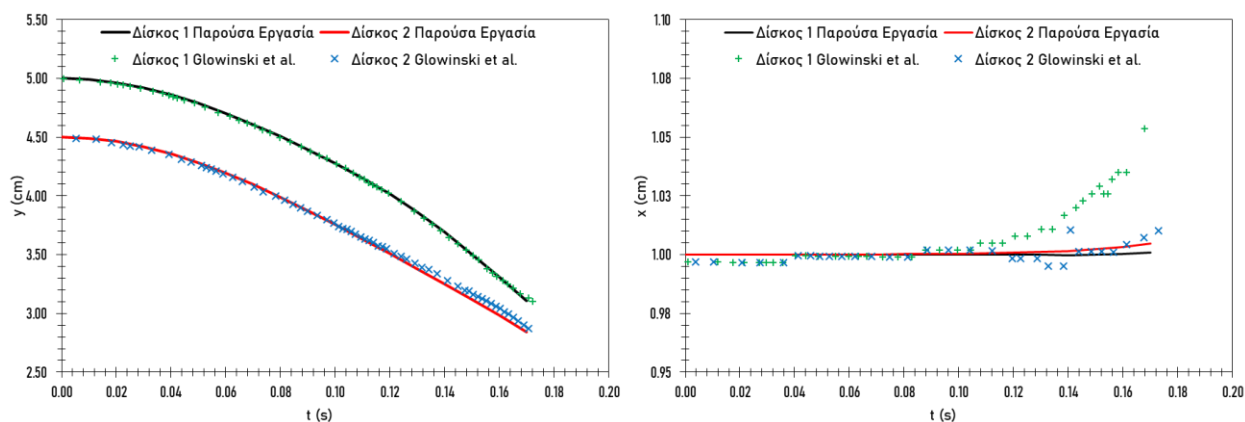
Η επαλήθευση του υπολογιστικού μοντέλου για κυκλικά σωματίδια έγινε με βάση την ακόλουθη δημοσίευση των Glowinski et al. [18]. Από τις προσομοιώσεις αυτής της δημοσίευσης επιλέχθηκε αυτή για την καθίζηση δύο δίσκων στο κέντρο του δοχείου. Ο υπολογιστικός χώρος Ω ορίζεται ως παραλληλόγραμμο $(0, 2) \times (0, 6)$. Οι αρχικές θέσεις των δίσκων είναι $(x_{o1}, y_{o1}) = (1, 5)$ και $(x_{o2}, y_{o2}) = (1, 4.5)$. Ο λόγος αποκλεισμού ισούται με $\beta = 8$, το $\gamma = 1.25$ και το ιξώδες ισούται με $\mu = 0.001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$. Η γεωμετρία και οι οριακές συνθήκες της προσομοίωσης παρουσιάζονται στην Εικόνα 2.6. Το ύψος του καναλιού είναι L , το πλάτος W .

Αρχικά διεξάχθηκε μία ανάλυση ώστε να βρεθεί το χαρακτηριστικό μέγεθος του πλέγματος h . Η διάμετρος d επιλέχθηκε ως χαρακτηριστικό μέγεθος του υπολογιστικού πλέγματος. Η λύση σταμάτησε να αλλάζει για μέγιστη και ελάχιστη τιμή του $h = d/6$ και $h = d/36$. Τα μικρότερα στοιχεία του πλέγματος βρίσκονται κοντά στα σωματίδια με το μέγεθός τους να αυξάνεται σταδιακά μακρύτερα από αυτά. Σε μεγάλη απόσταση από τα σωματίδια το h παίρνει τη μέγιστη τιμή του. Εικόνα του πλέγματος φαίνεται στη Εικόνα 2.6.



Εικόνα 2.6 Γεωμετρία και οριακές συνθήκες του προβλήματος και υπολογιστικό πλέγμα

Στην Εικόνα 2.7 φαίνεται η λύση της παρούσας εργασίας και τα αποτελέσματα της δημοσίευσης των Glowinski et al. [18]. Τα μεγέθη που παρουσιάζονται είναι i) η θέση y και ii) και η θέση x των δύο σωματιδίων σε συνάρτηση με το χρόνο. Οι άξονες ορίζονται στην Εικόνα 2.6 στα πλαίσια αυτής της προσομοίωσης. Βλέπουμε ότι για την θέση ως προς y οι μετατοπίσεις και στις δύο εργασίες είναι οι ίδιες. Για την θέση ως προς x όμως η μετατόπιση στην παρούσα εργασία είναι μικρότερη. Το γεγονός αυτό, δείχνει ότι το μοντέλο που εφαρμόστηκε στην παρούσα εργασία διατηρεί καλύτερα τη συμμετρία του προβλήματος.

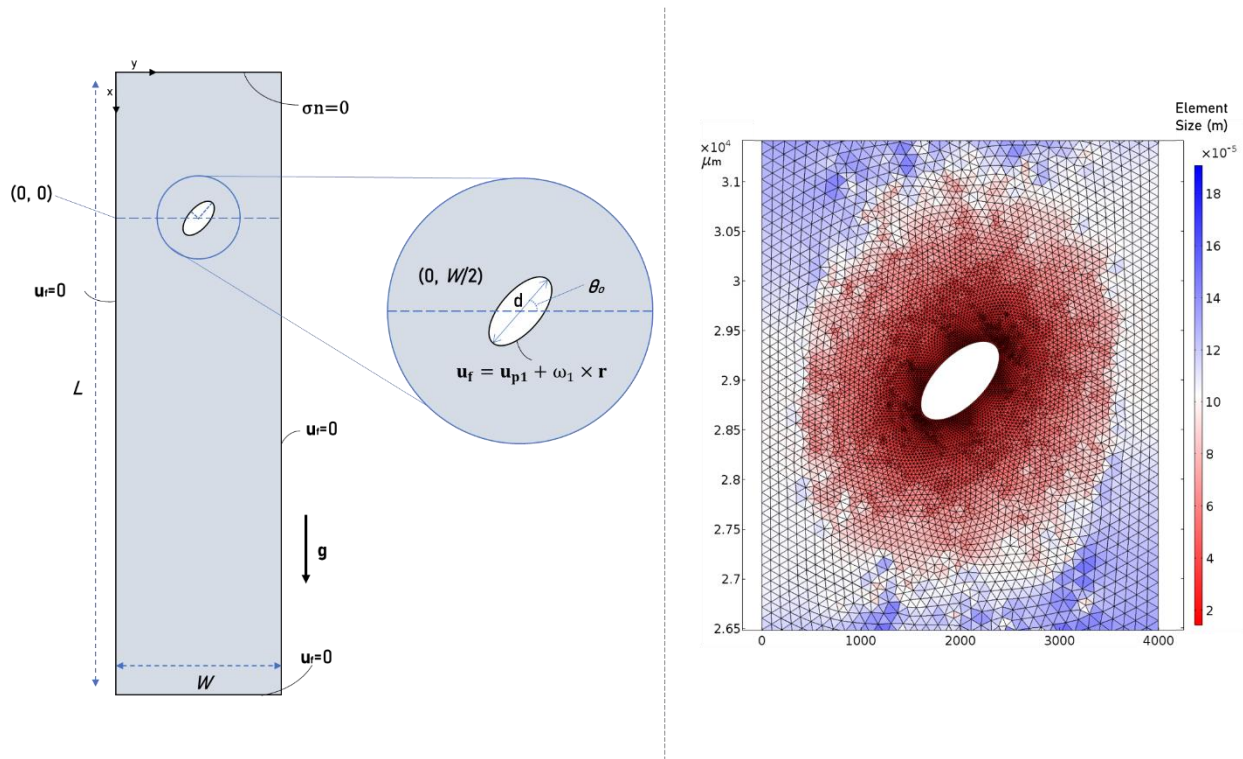


Εικόνα 2.7 Οι συντεταγμένες για τη θέση ως προς i) y και ii) x για τους δύο δίσκους σε συνάρτηση με το χρόνο για την παρούσα εργασία και για αυτή των Glowinski et al.

2.3.2.2 Ελλειπτικό σωματίδιο

Η επαλήθευση του υπολογιστικού μοντέλου για τα ελλειπτικά σωματίδια έγινε με βάση την ακόλουθη δημοσίευση των Xia et al. [24]. Η προσομοίωση που θα χρησιμοποιηθεί από τη δημοσίευση αυτή αφορά την καθίζηση ενός ελλειπτικού σωματιδίου. Η μέθοδος επίλυσης που χρησιμοποιήθηκε από τους Xia et al. είναι η Lattice Boltzmann. Η γεωμετρία και οι οριακές συνθήκες της προσομοίωσης παρουσιάζονται στην Εικόνα 2.8. Το ύψος του καναλιού είναι L , το πλάτος W , και η αρχική περιστροφή θ_0 . Το ιξώδες μ ισούται με 0.001 (Pa*s), η πυκνότητα του νερού ρ_f με 1000 (kg/m³) η διάμετρος $d=0.1$ (cm), ο λόγος διαστάσεων α ισούται με 2 , ο λόγος αποκλεισμού β ισούται με 8 , ο λόγος πυκνοτήτων γ ισούται με 1.1 και τέλος το ύψος L , ισούται με $18.5W$.

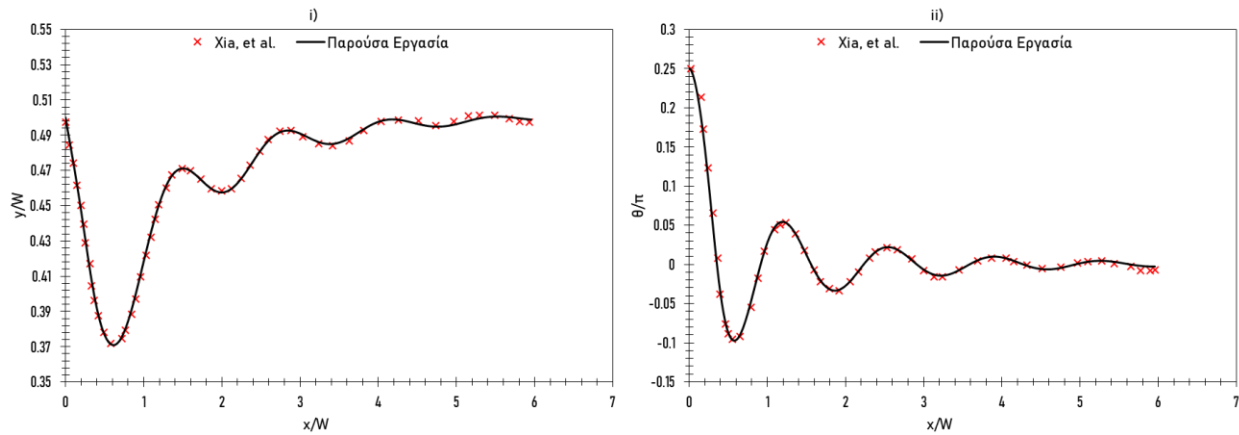
Όσον αφορά την προσομοίωση ο τύπος πλέγματος που επιλέχθηκε είναι το ελεύθερο τριγωνικό. Η διάμετρος d επιλέχθηκε ως χαρακτηριστικό μέγεθος του υπολογιστικού πλέγματος. Ύστερα από δοκιμές με όλο και μικρότερα πλέγματα επιλέχθηκε πλέγμα με μέγιστο και ελάχιστο μέγεθος του ενός στοιχείου $d/6$ και $d/48$ αντίστοιχα. Αξίζει να σημειωθεί ότι τα ελλειπτικά σωματίδια απαιτούν σημαντικά πυκνότερο πλέγμα και άρα επιπλέον υπολογιστικό χρόνο σε σχέση με τα κυκλικά. Τα πιο μικρά στοιχεία του πλέγματος βρίσκονται κοντά στο σωματίδιο και μεγαλώνουν όσο αυξάνεται η απόσταση από αυτό (Εικόνα 2.6).



Εικόνα 2.8 Γεωμετρία και οριακές συνθήκες του προβλήματος και υπολογιστικό πλέγμα

Ακολουθεί η σύγκριση των αποτελεσμάτων αυτής της εργασίας με αυτά της προαναφερθείσας δημοσίευσης. Οι άξονες ορίζονται στην Εικόνα 2.8 στα πλαίσια αυτής της προσομοίωσης. Από τα διαγράμματα στην Εικόνα 2.9. βλέπουμε ότι τα αποτελέσματά της παρούσας

εργασίας βρίσκονται σε συμφωνία με τους Xia et al. [24]. Η διαφορά της θέσης y/W στο τέλος της προσομοίωσης είναι της τάξης του 0.3%. Όπως φαίνεται από το διάγραμμα η τροχιά του σωματιδίου ταλαντώνεται με φθίνοντα τρόπο γύρω από τον άξονα του αγωγού καθώς το σωματίδιο καθιζάνει υπό την επίδραση της βαρύτητας. Και στην περιστροφική κίνηση το σωματίδιο ταλαντώνεται με αντίστοιχο τρόπο γύρω από την οριζόντια θέση ($\theta=0$).



Εικόνα 2.9 Αποτελέσματα της παρούσας εργασίας σε σύγκριση με αυτή των Xia et al. , για την i) αδιαστατοιμημένη τροχιά και ii) αδιαστατοιμημένη γωνιακή μετατόπιση ως προς x/W .

3 Αποτελέσματα και Συζήτηση

3.1 Αποτελέσματα για ένα σωματίδιο

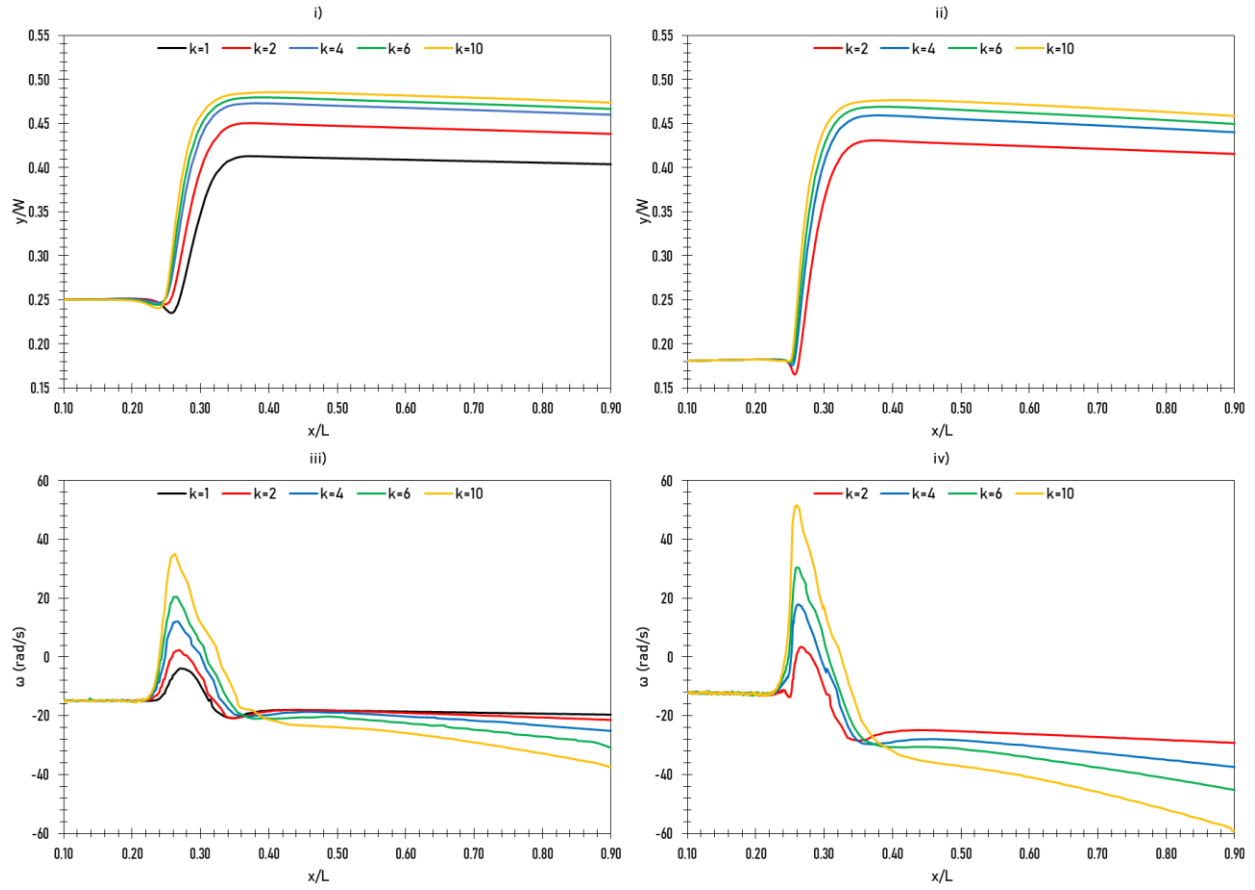
3.1.1 Αποτελέσματα για κυκλικό σωματίδιο

Στο κεφάλαιο αυτό εξετάζεται ο εστιασμός ενός κυκλικού δίσκου και συγκεκριμένα πως αυτός επηρεάζεται από το λόγο ροής, k και την απόσταση της επιφάνειας του σωματιδίου από το τοίχωμα του αγωγού, s . Για αυτό το σκοπό, σωματίδιο με χαρακτηριστικά που αναγράφονται στον Πίνακα 3.1, αφήνεται με μηδενική ταχύτητα από διάφορες αρχικές θέσεις (με $s=d/4$ & $s=d/24$). Πριν διεξαχθούν οι προσομοιώσεις για τον εστιασμό εξετάζεται η πορεία σωματιδίου που βρίσκεται στον άξονα του αγωγού, $(x_0, y_0)=(W, W/2)$, ώστε να επιβεβαιωθεί ότι η συμμετρία του προβλήματος διατηρείται και για υψηλές τιμές του k .

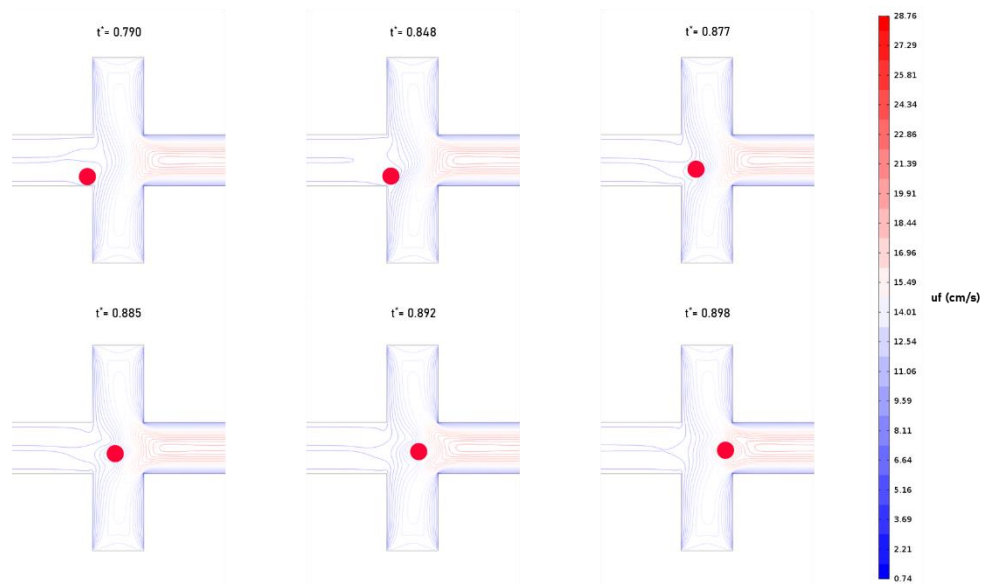
Πίνακας 3.1 Χαρακτηριστικά της έλλειψης.

Λόγος Διαστάσεων	$\alpha=1$
Λόγος Αποκλεισμού	$\beta=6$
Λόγος Πυκνοτήτων	$\gamma=1.250$
Αρχική Θέση	$(x_0, y_0)=(W, s+d/2)$,

Στην Εικόνα 3.1 απεικονίζονται οι αδιαστατοποιημένες τροχιές και η γωνιακή ταχύτητα σε συνάρτηση με την αδιαστατοποιημένη θέση ως προς x , για διάφορες τιμές του k . Ποιοτικά, ανεξαρτήτως του k και της αρχικής θέσης τα σωματίδια συμπεριφέρονται με όμοιο τρόπο. Αρχικά το σωματίδιο ακολουθεί ευθεία τροχιά μέχρι να φτάσει στην περιοχή εστιασμού. Εκεί οι υδροδυναμικές δυνάμεις το ωθούν προς τον άξονα του αγωγού. Με την έξοδό του από την περιοχή εστιασμού το σωματίδιο συνεχίζει σε μία ευθεία τροχιά, πιο κοντά όμως στον κεντρικό άξονα του αγωγού σε σχέση με την αρχική του θέση (παρατηρείται μικρή απομάκρυνση του σωματιδίου από το κέντρο του αγωγού, μικρότερη της τάξης του 3% μέχρι το σωματίδιο να φτάσει το άκρο του αγωγού). Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του k τόσο πιο κοντά στον κεντρικό άξονα του αγωγού πλησιάζει το σωματίδιο. Η επίδραση που έχει όμως το k στην τελική θέση του σωματιδίου ελαττώνεται με την διαδοχική αύξηση της τιμής του. Σε σχέση με την περιστροφική ταχύτητα αυτή είναι αντίθετη στη φορά των δεικτών του ρολογιού πριν και μετά την περιοχή εστιασμού. Πριν την περιοχή εστιασμού η γωνιακή ταχύτητα είναι ανεξάρτητη του k . Μετά την περιοχή εστιασμού, όταν η τιμή του k είναι μικρή ($k<2$) η γωνιακή ταχύτητα παραμένει σχετικά σταθερή. Σε αντίθετη περίπτωση το μέτρο της αρχίζει να αυξάνεται σημαντικά. Μέσα στην περιοχή εστιασμού το μέτρο περιστροφικής ταχύτητας αρχίζει να ελαττώνεται και για $k>1$ η φορά της αναστρέφεται. Η αλλαγή αυτή οφείλεται στις υδροδυναμικές δυνάμεις ως προς y που ασκούνται στο σωματίδιο στην περιοχή εστιασμού λόγω τις κοντινότερης κάθετης ροής σε αυτό. Στην Εικόνα 3.2 παρουσιάζονται οι καμπύλες ίσου μέτρου ταχύτητας, καθώς ο δίσκος περνά μέσα από την περιοχή εστιασμού. Φαίνεται ότι στην περιοχή κοντά στο σωματίδιο η ροή επηρεάζεται σημαντικά από την κίνησή του. Μακριά από την περιοχή αυτή όμως, η ροή είναι ανεπηρέαστη.



Εικόνα 3.1 Αδιαστατοποιημένη τροχιά και γωνιακή ταχύτητα σε σχέση με την αδιαστατοποιημένη θέση για δίσκους με απόσταση της επιφάνειάς τους με το τοίχωμα του αγωγού $s=d/4$ (i,iii) και $s=d/24$ (ii,iv).



Εικόνα 3.2 Καμπύλες ίσου μέτρου της ταχύτητας για διάφορους αδιαστατοποιημένους χρόνους t^* . Απόσταση $s=d/24$, και $k=6$

3.1.2 Αποτελέσματα για ελλειπτικό σωματίδιο

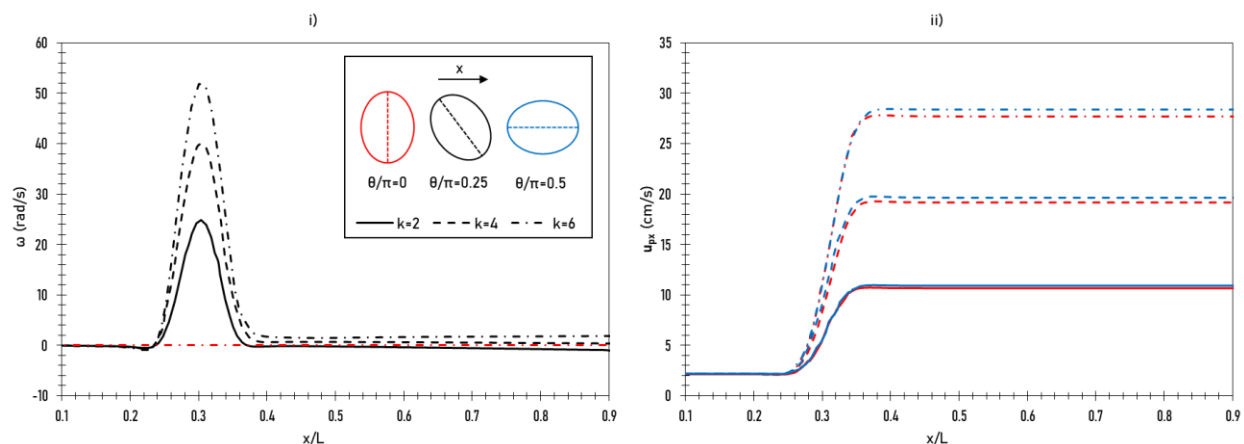
3.1.2.1 Αρχική γωνία έλλειψης στον άξονα του αγωγού

Αρχικά εξετάζεται το πώς η αρχική γωνία, θ_0 και ο λόγος ροής, k επηρεάζουν την συμπεριφορά μίας έλλειψης μέσα στη συσκευή υδροδυναμικού εστιασμού. Τα χαρακτηριστικά της έλλειψης που μελετάται αναγράφονται στον Πίνακα 3.2.

Πίνακας 3.2 Χαρακτηριστικά της έλλειψης.

Λόγος Διαστάσεων	$\alpha=1.33$
Λόγος Αποκλεισμού	$\beta=6$
Λόγος Πυκνοτήτων	$\gamma=1.059$
Αρχική Θέση	$(x_0, y_0)=(W, W/2)$
Αρχική Γωνία	$\theta_0=0, \pi/4, \pi/2$

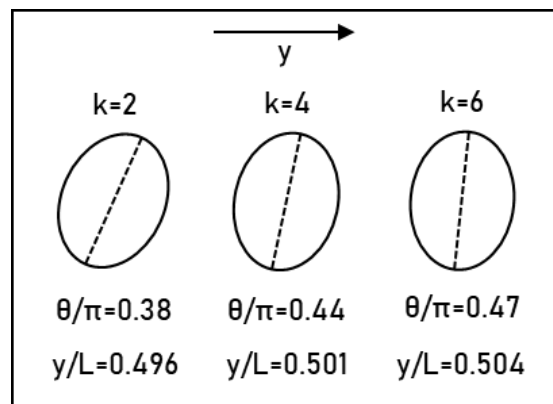
Ο ελλειπτικός δίσκος αφήνεται από την αρχική του θέση έχοντας αρχικά μηδενική ταχύτητα. Στην Εικόνα 3.3 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την ταχύτητα ως προς τον άξονα x , u_{px} και για τη περιστροφική ταχύτητα, ω σε συνάρτηση με την αδιάστατη θέση του παραπάνω ελλειπτικού δίσκου. Η περιστροφική ταχύτητα ενός ελλειπτικού δίσκου με αρχική γωνία, $\theta_0=0$ και $k=6$ είναι $\omega=0$ rad/s καθ' όλη την τροχιά του σωματιδίου. Το ίδιο ισχύει για όλες τις τιμές του k ($=2,4,6$) για $\theta_0=0$ και $\theta_0=\pi/2$. Το σωματίδιο δεν περιστρέφεται στις θέσεις αυτές λόγω συμμετρίας. Το μοντέλο διατηρεί τη συμμετρία αυτή του προβλήματος για όλες τις τιμές του k , γεγονός που ενισχύει την πιστότητα του.



Εικόνα 3.3 Αποτελέσματα για την περιστροφική ταχύτητα (i) και για τη μεταφορική ταχύτητα ως προς τον άξονα των x (ii) για διάφορες αρχικές γωνίες και k .

Παράλληλα η αρχική γωνία επηρεάζει και την ταχύτητα ως προς τον άξονα των x . Όταν αυτή είναι μηδενική, η τιμή του u_{px} είναι πάντα μικρότερη σε σχέση με όταν εκείνη είναι κάθετη. Αύξηση του λόγου ροής, k προκαλεί άνοδο τόσο της μεταφορικής όσο και της περιστροφικής ταχύτητας για το σωματίδιο με $\theta_0 = \pi/4$. Αναλυτικότερα, η περιστροφική ταχύτητα αυξάνεται στην περιοχή εστιασμού λόγω των ανόμοιων διατμητικών τάσεων, ενώ στη συνέχεια ισορροπεί σε μία μικρότερη τιμή.

Στην Εικόνα 3.4 παρουσιάζονται η τελική γωνία και θέση του σωματιδίου με $\theta_0 = \pi/4$ για διάφορα k . Αύξηση της τιμής του k προκαλεί ταυτόχρονη αύξηση της τελικής γωνίας του σωματιδίου με αυτή να τείνει να γίνει κάθετη. Η τελική θέση του σωματιδίου δεν φαίνεται να επηρεάζεται σημαντικά από την αρχική γωνία του σωματιδίου. Συγκεκριμένα, δεν φαίνεται να υπάρχει σημαντική μεταφορά ως προς τον άξονα y , σε αντίθεση με την καθίζηση ελλειπτικού σωματιδίου που εξετάστηκε κατά την επαλήθευση του υπολογιστικού μοντέλου. Για τις αρχικές γωνίες $\theta_0 = 0$ και $\theta_0 = \pi/2$, επίσης δεν υπάρχει μεταφορά ως προς τον άξονα y λόγω συμμετρίας.



Εικόνα 3.4 Η τελική θέση και γωνία από το σωματίδιο με αρχική γωνία $\theta_0 = \pi/4$ rad.

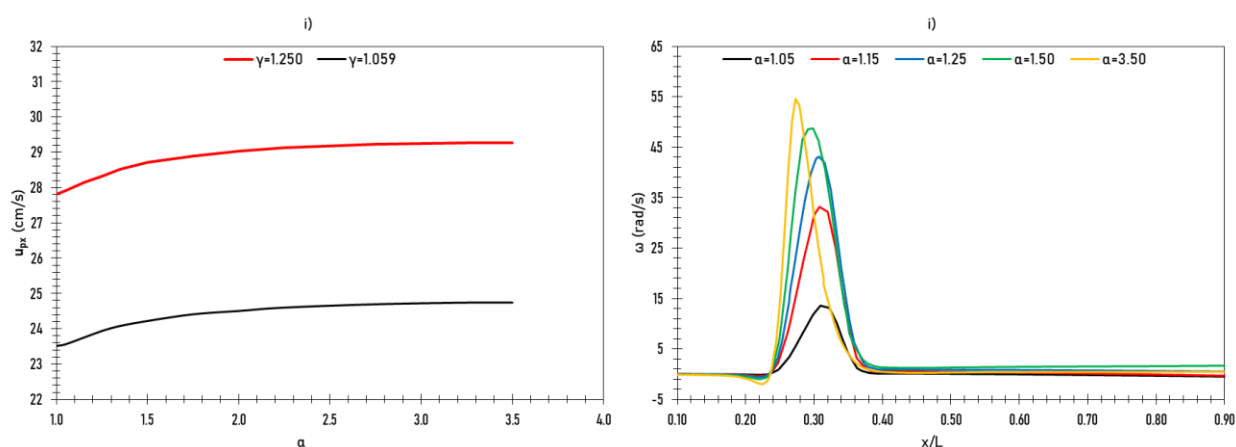
3.1.2.2 Λόγος διαστάσεων έλλειψης στον άξονα του αγωγού

Στη συνέχεια εξετάζεται η επίδραση του λόγου διαστάσεων α της έλλειψης στη συμπεριφορά της μέσα σε μία συσκευή εστιασμού. Τα χαρακτηριστικά της έλλειψης που εξετάζεται αναγράφονται στον Πίνακα 3.3.

Πίνακας 3.3 Χαρακτηριστικά της έλλειψης.

Λόγος Διαστάσεων	$\alpha = 1-3.5$
Λόγος Αποκλεισμού	$\beta = 6$
Λόγος Πυκνοτήτων	$\gamma = 1.059 \text{ \& } 1.250$
Αρχική Θέση	$(x_0, y_0) = (W, W/2)$
Αρχική Γωνία	$\theta_0 = \pi/4$

Ο λόγος ροής, k ισούται με 5. Στην Εικόνα 3.5 παρουσιάζεται η τελική ταχύτητα του σωματιδίου ως προς τον x άξονα u_{px} , σε συνάρτηση με τον λόγο διαστάσεων α , για τις δύο τιμές του γ και η περιστροφική ταχύτητα ω , σε συνάρτηση με την αδιαστατοποιημένη θέση ως προς x για διάφορες τιμές του α . Η ταχύτητα παρουσιάζει αυξητική τάση με την αύξηση του λόγου διαστάσεων α , έως ότου αυτή φτάσει σε μία σταθερή τιμή. Η έλλειψη μεγαλύτερης πυκνότητας έχει μεγαλύτερη ταχύτητα. Με αντίστοιχο τρόπο συμπεριφέρεται και η περιστροφική ταχύτητα στην περιοχή εστιασμού. Αξίζει να σημειωθεί ότι η περιστροφική ταχύτητα συμπεριφέρεται με ανάλογο τρόπο με αυτό στην Εικόνα 3.3 i) στο προηγούμενο κεφάλαιο, με τη μόνη διαφορά ότι με την αύξηση της τιμής του α , το ω μεγιστοποιείται σε πιο πρώιμο σημείο της τροχιάς.



Εικόνα 3.5 Τελική ταχύτητα του σωματιδίου (ως προς τον x άξονα) u_{px} σε συνάρτηση με τον λόγο διαστάσεων α (i) και η περιστροφική ταχύτητα ω , σε συνάρτηση με την αδιαστατοποιημένη θέση ως προς x για διάφορες τιμές του α (ii).

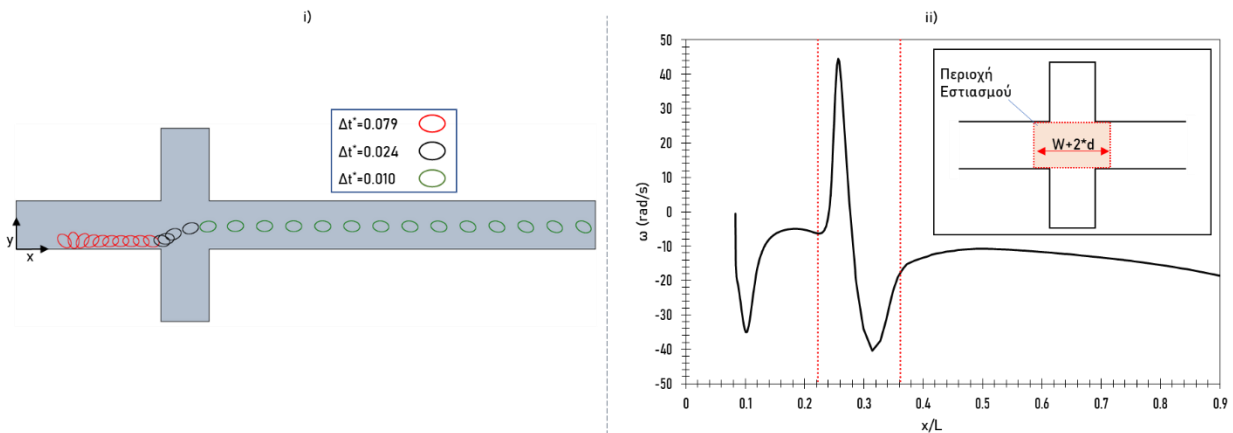
3.1.2.3 Εστιασμός ελλειπτικού σωματιδίου

Στο κεφάλαιο αυτό εξετάζεται ο εστιασμός ενός ελλειπτικού σωματιδίου και συγκεκριμένα πως αυτός επηρεάζεται από το λόγο ροής, k . Για το σκοπό αυτό, ελλειπτικό σωματίδιο, με χαρακτηριστικά που αναγράφονται στο Πίνακα 3.4, αφήνεται από δύο διαφορετικές αρχικές θέσεις.

Πίνακας 3.4 Χαρακτηριστικά της έλλειψης.

Λόγος Διαστάσεων	$\alpha=1.5$
Λόγος Αποκλεισμού	$\beta=6$
Λόγος Πυκνοτήτων	$\gamma=1.059$
Αρχική Θέση	$(x_0, y_0)=(W, W/6) \text{ \& } (W, W/4)$
Αρχική Γωνία	$\theta_0=\pi/4$

Αρχικά, την Εικόνα 3.6 παρουσιάζονται στιγμιότυπα της τροχιάς ελλειπτικού σωματιδίου και η περιστροφική του ταχύτητα σε σχέση με την αδιαστατοποιημένη θέση ως προς x . Ο λόγος ροής, k είναι 5 και η αρχική θέση του σωματιδίου $(x_{i0}, y_{i0})=(W, W/6)$. Το σωματίδιο αρχικά βρίσκεται κοντά στο τοίχωμα του καναλιού έως ότου φτάσει στην περιοχή εστιασμού. Εκεί οι υδροδυναμικές δυνάμεις που ασκούνται από το υγρό θήκης το ωθούν προς τον κεντρικό άξονα του αγωγού. Ως περιοχή εστιασμού έχει οριστεί ο χώρος μέσα στη συσκευή όπου έστω μέρος του σωματιδίου μπορεί να βρίσκεται στην περιοχή, όπου ο οριζόντιος αγωγός ενώνεται με τους δύο κάθετους. Όσον αφορά τη περιστροφική ταχύτητα, αρχικά ακολουθεί τη φορά των δεικτών του ρολογιού. Στην περιοχή εστιασμού η περιστροφή αυτή αντιστρέφεται, με τον μεγάλο άξονα της έλλειψης να είναι σχεδόν παράλληλος με τη φορά της ροής. Στη συνέχεια ακολουθεί μία ακόμα αναστροφή, με την περιστροφική ταχύτητα να μειώνεται απότομα. Με την έξοδο του σωματιδίου από την περιοχή εστιασμού, το μέτρο της περιστροφικής ταχύτητας μειώνεται, χωρίς όμως να αλλάζει η φορά της.

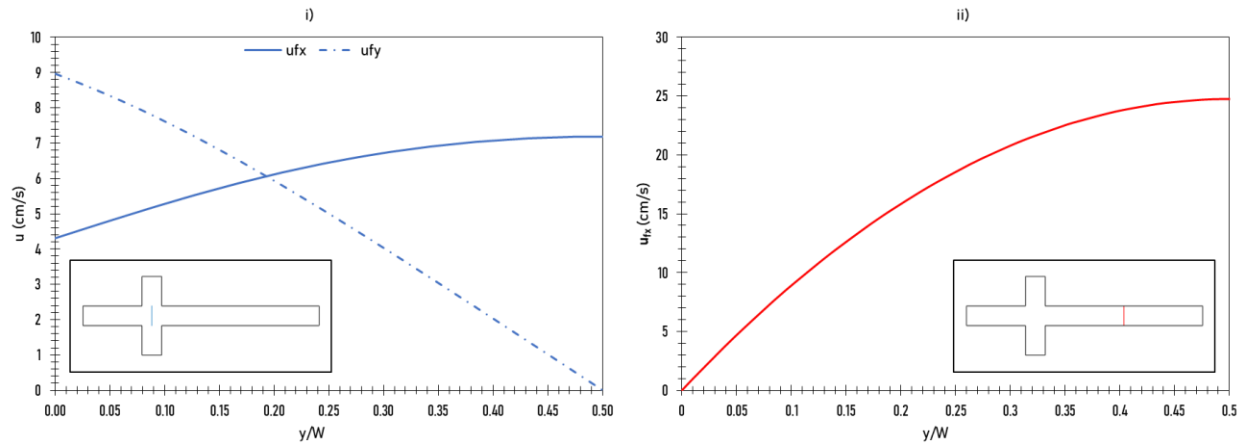


Εικόνα 3.6 i) Στιγμιότυπα της τροχιάς ελλειπτικού σωματιδίου (δεξιά) σε διάφορους αδιαστατοποιημένους χρόνους. ii) Η περιστροφική ταχύτητα του σωματιδίου σε σχέση με την αδιαστατοποιημένη θέση ως προς x . Η τιμή του k ισούται με 5 και η αρχική θέση του με $(x_{i0}, y_{i0})=(W, W/6)$.

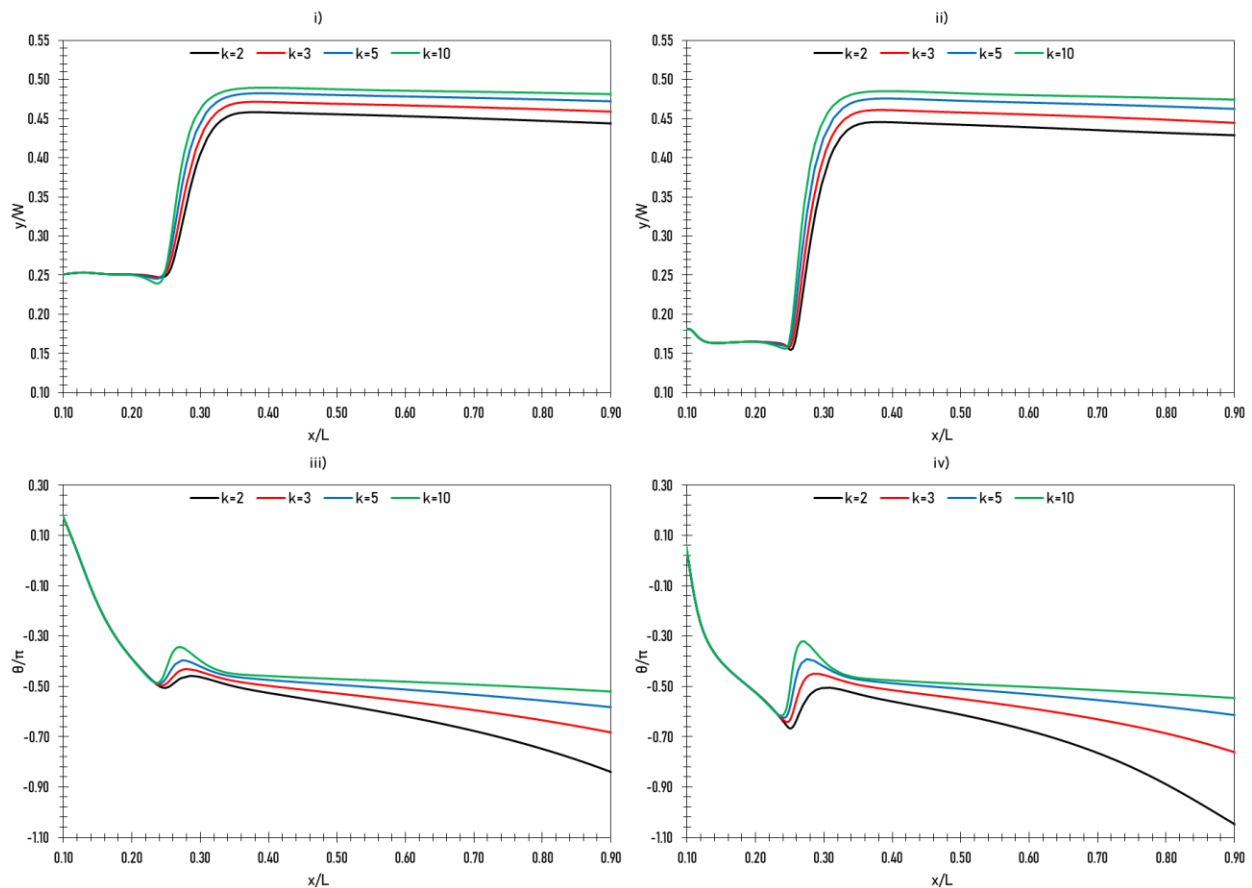
Η συμπεριφορά της έλλειψης εξηγείται από την κατανομή της ταχύτητας μέσα στη συσκευή εστιασμού. Στην Εικόνα 3.7 παρουσιάζεται η κατανομή της ταχύτητας του υγρού \mathbf{u}_f στον άξονα y στο μέσο της περιοχής εστιασμού $x=3.5*W$, και στο σημείο $x=8*W$. Επιλέχθηκε κατάλληλη χρονική στιγμή ώστε η ροή να μην επηρεάζεται από την έλλειψη. Ο λόγος ροής k , ισούται με 5. Εκτός της περιοχής εστιασμού η ταχύτητα του ρευστού ως προς x , \mathbf{u}_{fx} έχει το παραβολικό προφίλ όπως στο σημείο $x=8W$ (η είναι \mathbf{u}_{fx} αμελητέα σε αυτό το σημείο). Η συμπεριφορά αυτή είναι τυπική για στρωτή ροή. Καθώς η ταχύτητα αυξάνεται πιο κοντά στον άξονα του αγωγού οι διατμητικές τάσεις που δημιουργούνται ωθούν την έλλειψη να περιστραφεί αντίθετα με τον φορά των δεικτών του ρολογιού. Αντίθετα, η ταχύτητα του ρευστού ως προς y , \mathbf{u}_{fy} έχει σημαντική επίδραση στην περιοχή εστιασμού. Κατά συνέπεια οι ανόμοιες διατμητικές τάσεις ωθούν το σωματίδιο να περιστραφεί με τη φορά των δεικτών του ρολογιού.

Στην Εικόνα 3.8 παρουσιάζονται η αδιαστατοποιημένη τροχιά του σωματιδίου και η γωνία θ σε σχέση με την αδιαστατοποιημένη θέση ως προς τον άξονα x . Οι τιμές του k κυμαίνονται από 1 έως 5. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται αφορούν δύο αρχικές θέσεις $(x_0, y_0)=(W, W/6)$ και $(x_0,$

$y_0)=(W,W/4)$. Με την αύξηση της τιμής του k ο δίσκος πλησιάζει περισσότερο προς τον κεντρικό άξονα του αγωγού.



Εικόνα 3.7 Κατανομή της ταχύτητας του υγρού στον άξονα y (αδιαστατοποιημένος) στο μέσω της περιοχής εστιασμού $x=3.5*W$ (i), και στο σημείο $x=8*W$ (ii). Το k είναι ίσο με 5.



Εικόνα 3.8 Αδιαστατοποιημένη τροχιά και αδιαστατοποιημένη γωνιακή μετατόπιση σε συνάρτηση με την αδιαστατοποιημένη θέση ως προς x . Αρχική θέση $(W,W/4)$ (i, iii) και $(W,W/6)$ (ii, iv).

Η επίδραση του k όμως ελαττώνεται με την αύξηση της τιμής του. Καθώς το σωματίδιο απέχει ένα μικρό διάστημα από τον άξονα του αγωγού, δεν βρίσκεται σε θέση ισορροπίας. Κατά συνέπεια υπάρχει μία μικρή μετατόπιση προς το τοίχωμα του αγωγού (μικρότερη του 3%). Παράλληλα, η τελική γωνία της έλλειψης ελαττώνεται όσο αυτή βρίσκεται στον κύριο αγωγό. Η μείωση όμως είναι μικρότερη για μεγαλύτερες τιμές του k . Αυτό εξηγείται από τον καλύτερο εστιασμό που συμβαίνει με την αύξηση του k . Λόγω του παραβολικού προφίλ της ταχύτητας στον κύριο αγωγό, όσο πιο κοντά στο άξονα του βρίσκεται η έλλειψη, τόσο οι διατμητικές τάσεις μειώνονται.

3.2 Αποτελέσματα για πολλαπλά σωματίδια

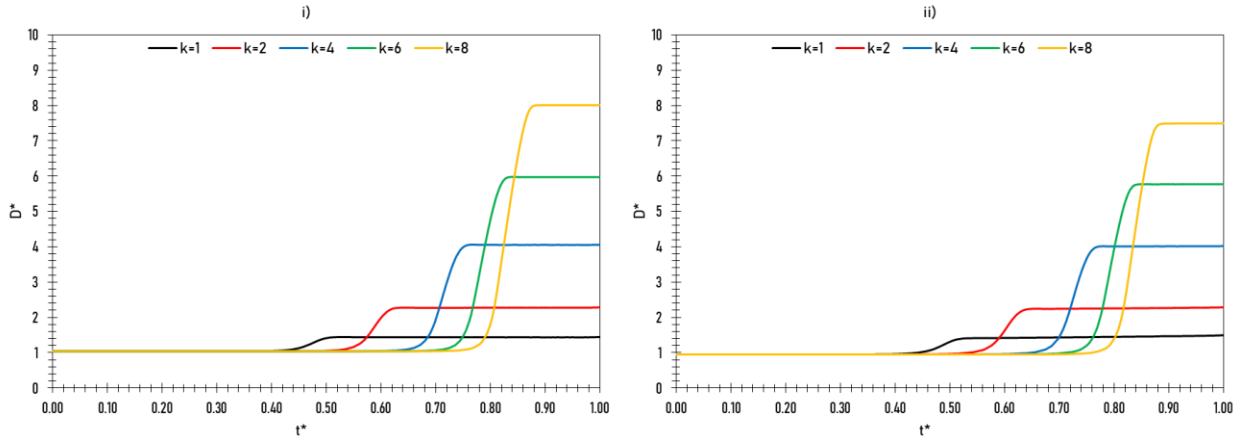
Εκτός από τον εστιασμό που μελετήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο σημαντικός στόχος στον υδροδυναμικό εστιασμό είναι και ο διαχωρισμός των σωματιδίων. Για το σκοπό αυτό θα διεξαχθούν προσομοιώσεις και με πολλαπλά σωματίδια. Συγκεκριμένα στο κεφάλαιο αυτό εξετάζεται το πώς ο λόγος ροής k επηρεάζει την τελική απόσταση μεταξύ των σωματιδίων αυτών.

3.2.1 Εστιασμός δύο σωματιδίων στον άξονα του αγωγού

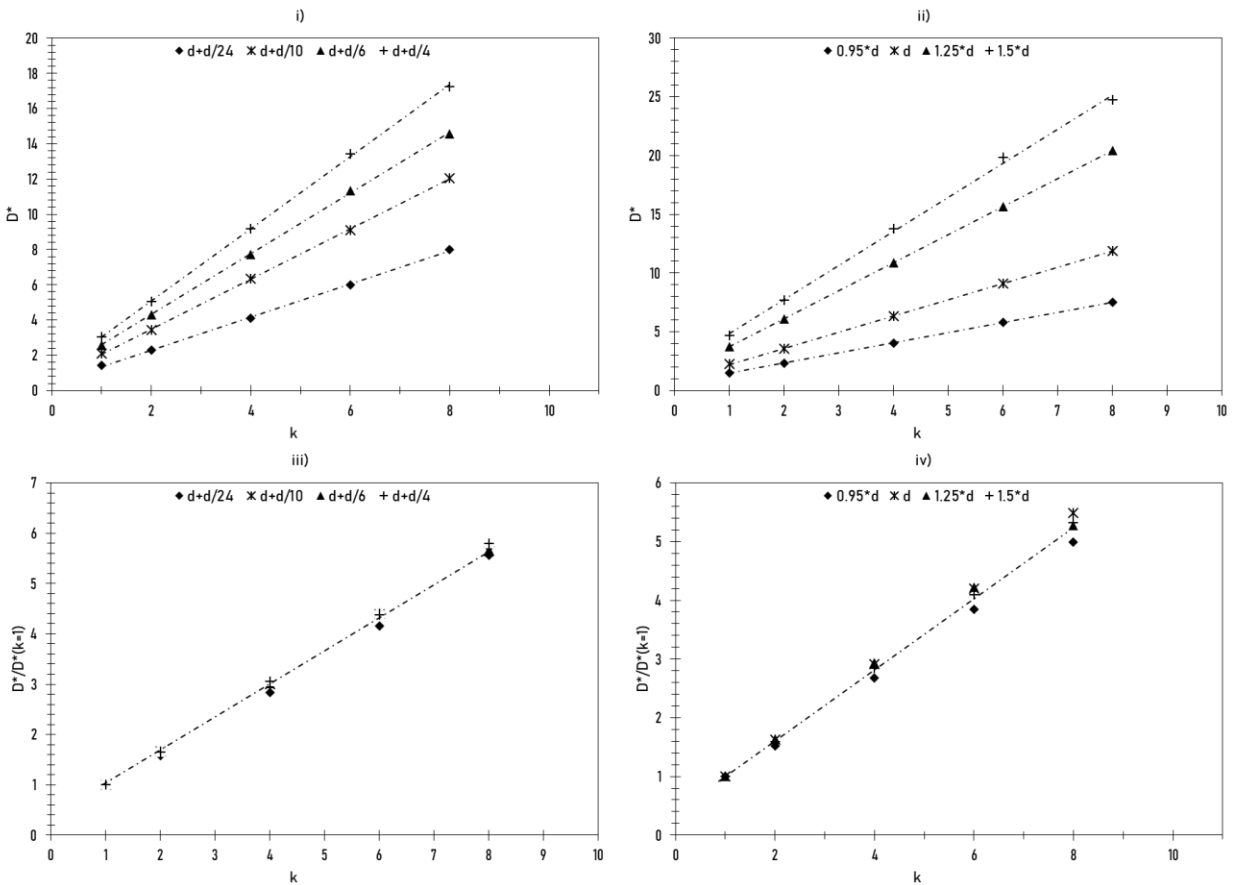
Αρχικά εξετάζεται η πιο απλή περίπτωση, με δύο σωματίδια στον άξονα του αγωγού. Διεξάγονται δύο σειρές προσομοιώσεων μία για κυκλικά και μία για ελλειπτικά σωματίδια. Τα χαρακτηριστικά των παραπάνω σωματιδίων αναγράφονται στον Πίνακα 3.5. Η απόσταση μεταξύ δύο σωματιδίων ονομάζεται D (η αρχική απόσταση μεταξύ διαδοχικών σωματιδίων D_0). Στην Εικόνα 3.9 φαίνεται η αδιάστατη απόσταση, $D^*=D/d$ σε συνάρτηση με τον αδιάστατο χρόνο, $t^*=t/T$, (όπου T ο χρόνος που το προπορευόμενο σωματίδιο φτάνει το τέλος του αγωγού) για κυκλικούς δίσκους με αρχική απόσταση $D_0=d+d/24$ και ελλειπτικούς δίσκους με $D_0=0.95d$ και για διάφορες τιμές του k . Και τα δύο είδη σωματιδίων συμπεριφέρονται με ανάλογο τρόπο. Αρχικά η απόσταση είναι σταθερή μέχρι το προπορευόμενο σωματίδιο να εισέρθει στη περιοχή εστιασμού. Από τη στιγμή εκείνη μέχρι και το άλλο σωματίδιο να εξέλθει από την περιοχή εστιασμού η απόσταση μεταξύ τους αυξάνεται λόγω των ροών θήκης. Στη συνέχεια η απόσταση μεταξύ τους σταθεροποιείται και πάλι σε μια τιμή μεγαλύτερη από την αρχική. Όπως αναμένεται άνοδος της τιμής του k προκαλεί επίσης άνοδο της τελικής απόστασης των σωματιδίων.

Πίνακας 3.5 Χαρακτηριστικά σωματιδίων

Λόγος Διαστάσεων	$\alpha=1$	$\alpha=1.33$
Λόγος Αποκλεισμού	$\beta=6$	$\beta=6$
Λόγος Πυκνοτήτων	$\gamma=1.250$	$\gamma=1.059$
Αρχικές Θέσεις	$(x_{01}, y_{01})=(W, W/2)$ $(x_{02}, y_{02})=(W+D_0, W/4)$	$(x_{01}, y_{01})=(W, W/2)$ $(x_{02}, y_{02})=(W+D_0, W/4)$
Αρχική Γωνία	-	$\theta_{01}=40^\circ, \theta_{02}=-80^\circ$



Εικόνα 3.9 Η αδιάστατη απόσταση, $D^*=D/d$ σε συνάρτηση με τον αδιάστατο χρόνο, $t^*=t/T$ για κυκλικούς δίσκους με αρχική απόσταση $D_0=d+d/24$ (i) και ελλειπτικούς δίσκους με $D_0=0.95*d$ (ii). Οι τιμές του k κυμαίνονται από 1-8.

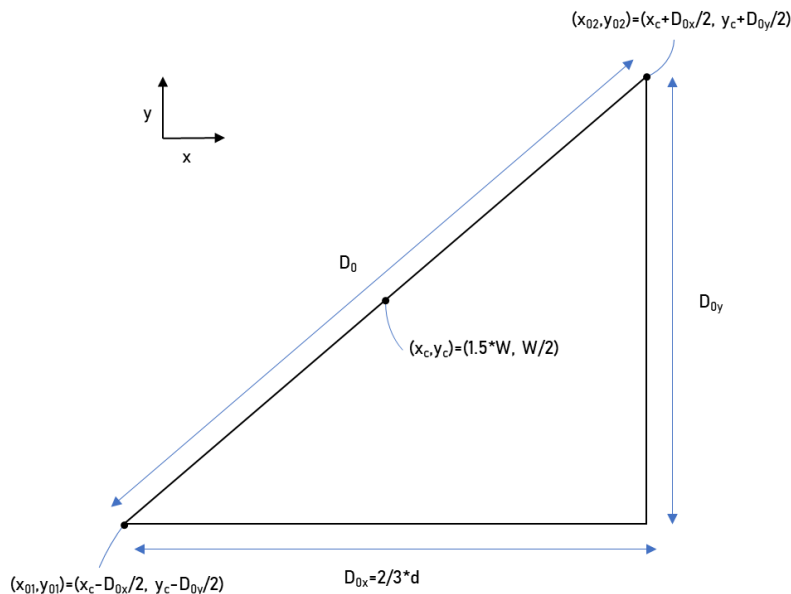


Εικόνα 3.10 Γραμμικές σχέσεις των αδιάστατων τελικών αποστάσεων D^* για κυκλικά (i) και για ελλειπτικά (ii) σωματίδια και των λόγων $D^*/D^*(k=1)$ για κυκλικά (iii) και για ελλειπτικά (iv) σωματίδια, σε σχέση με το λόγο ροής k .

Στην Εικόνα 3.10 παρουσιάζεται η τελική αδιάστατη απόσταση σε σχέση με το λόγο ροής k για τα δύο είδη σωματιδίων και για διάφορες αρχικές αποστάσεις. Φαίνεται ότι η τελική απόσταση των σωματιδίων αυξάνεται γραμμικά σε σχέση με το k . Η σχέση αυτή παρατηρείται για όλες τις αρχικές αποστάσεις. Η ανάλυση ελαχίστων τετραγώνων επιβεβαιώνει αυτή την υπόθεση καθώς $R^2 > 0.99$. Παράλληλα ο λόγος της αδιάστατης απόστασης, D^* για κάποιο k προς την αδιάστατη απόσταση για $k=1$ $D^*(k=1)$ φαίνεται να ταυτίζεται για τις ίδιες τιμές του k ανεξαρτήτως της αρχικής απόστασης. Αυτό ισχύει και στις δύο σειρές προσομοιώσεων. Αυτό σημαίνει ότι γνωρίζοντας την τελική απόσταση D για $k=1$ που αντιστοιχεί σε κάποιο D_o , μπορούν να βρεθούν όλες οι άλλες τελικές αποστάσεις για οποιοδήποτε k .

3.2.2 Ταυτόχρονος διαχωρισμός και εστιασμός δύο σωματιδίων

Στη συνέχεια ακολουθεί η πιο δύσκολη περίπτωση του ταυτόχρονου διαχωρισμού και εστιασμού. Στο κεφάλαιο αυτό πάλι διεξάγονται δύο ομάδες προσομοιώσεων, μία για κυκλικά και μία για ελλειπτικά σωματίδια. Ο τρόπος με τον οποίο τοποθετούνται τα σωματίδια στον άξονα παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.3. Η θέση (x_c, y_c) βοηθά στον ορισμό των θέσεων των σωματιδίων. Η αποστάσεις D_{0x} και D_{0y} , είναι οι αρχικές αποστάσεις ως προς του άξονες x και y αντίστοιχα. Τα λοιπά χαρακτηριστικά των σωματιδίων αναγράφονται στον Πίνακα 3.6. Στην Εικόνα 3.12 αναγράφονται οι τροχιές των σωματιδίων για αρχική απόσταση $D_o = d + d/24$ για το κυκλικό δίσκο και $D_o = 0.875 * d$ για τον ελλειπτικό δίσκο. Οι τιμές του k ισούνται με 1 και 8. Από τις τροχιές των σωματιδίων φαίνεται ότι ο εστιασμός είναι επιτυχής για $k=8$. Αυτό σημαίνει ότι η αλληλεπίδραση των δύο σωματιδίων δεν δυσχεραίνει σημαντικά τον εστιασμό τους. Η συμπεριφορά των σωματιδίων είναι ανάλογη με αυτή του ενός κατά τον εστιασμό τους.

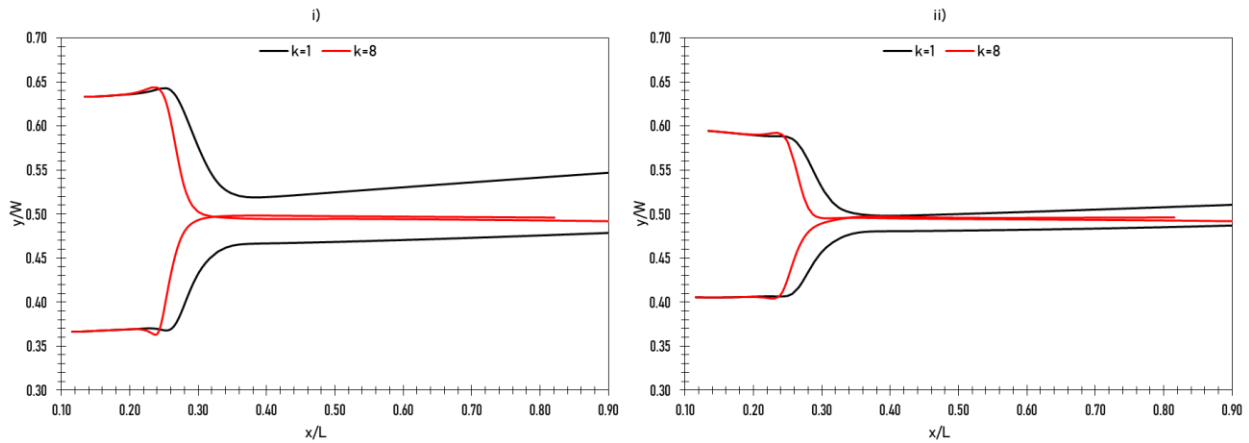


Εικόνα 3.11 Διάταξη των σωματιδίων

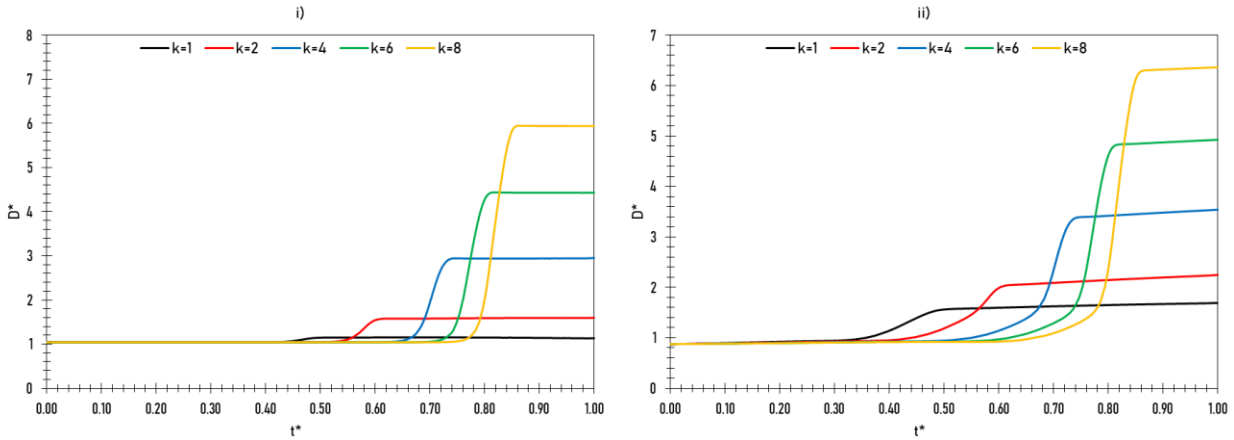
Πίνακας 3.6 Χαρακτηριστικά σωματιδίων

Λόγος Διαστάσεων	$\alpha=1$	$\alpha=1.33$
Λόγος Αποκλεισμού	$\beta=6$	$\beta=6$
Λόγος Πυκνοτήτων	$\gamma=1.250$	$\gamma=1.059$
Αρχικές Θέσεις	$(x_{01}, y_{01})=(x_c-D_{0x}/2, y_c-D_{0y}/2)$ $(x_{02}, y_{02})=(x_c+D_{0x}/2, y_c+D_{0y}/2)$	$(x_{01}, y_{01})=(x_c-D_{0x}/2, y_c-D_{0y}/2)$ $(x_{02}, y_{02})=(x_c+D_{0x}/2, y_c+D_{0y}/2)$
Αρχική Γωνία	-	$\theta_{01}=40^\circ, \theta_{02}=-80^\circ$

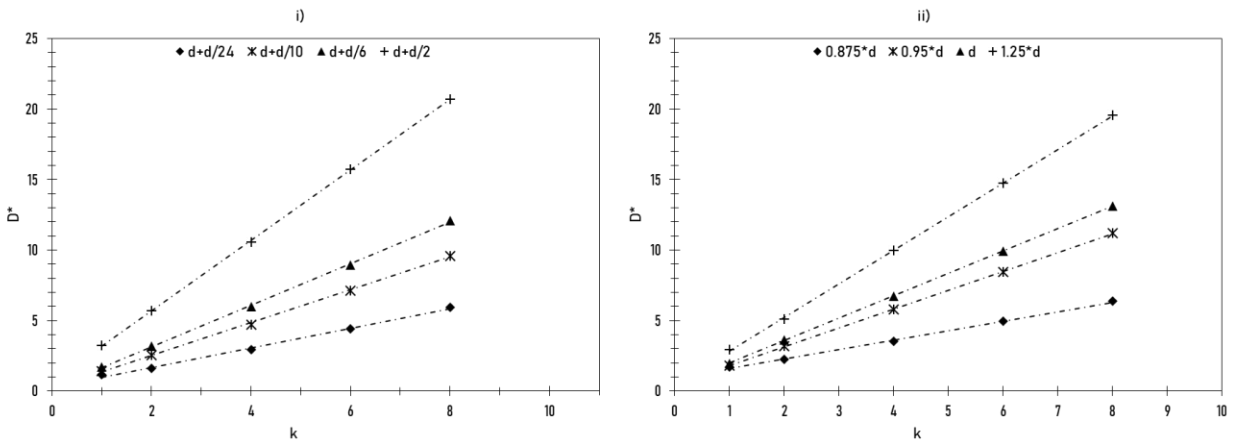
Στη συνέχεια εξετάζεται ο διαχωρισμός των σωματιδίων. Στην Εικόνα 3.13 παρουσιάζεται η αδιάστατη τελική απόσταση D^* σε συνάρτηση με τον αδιάστατο χρόνο t^* . Οι αρχικές αποστάσεις, D_o των σωματιδίων είναι $d+d/24$ και $1.75d$ για το δίσκο και την έλλειψη αντίστοιχα. Η ποιοτική συμπεριφορά της αδιάστατης απόστασης των σωματιδίων αντιστοιχεί με αυτή των δύο σωματιδίων στον άξονα του αγωγού. Παράλληλα στην Εικόνα 3.14 παρουσιάζεται και το διάγραμμα της τελικής αδιάστατης απόστασης D^* των σωματιδίων σε σχέση με το k για τα δύο είδη σωματιδίων και για διάφορες αρχικές αποστάσεις. Το D^* ακολουθεί πάλι γραμμική σχέση σε σχέση με το k όπως και στην προηγούμενη ενότητα. Και σε αυτή την περίπτωση το R^2 ξεπερνά το 0.99.



Εικόνα 3.12 Αδιάστατες τροχιές του κυκλικού (i) και του ελλειπτικού (ii) σωματιδίου. Η αρχική απόσταση είναι $D_o=d+d/24$ για το κυκλικό δίσκο και $D_o=0.875*d$ για τον ελλειπτικό δίσκο. Οι τιμές του k ισούνται με 1 και 8.



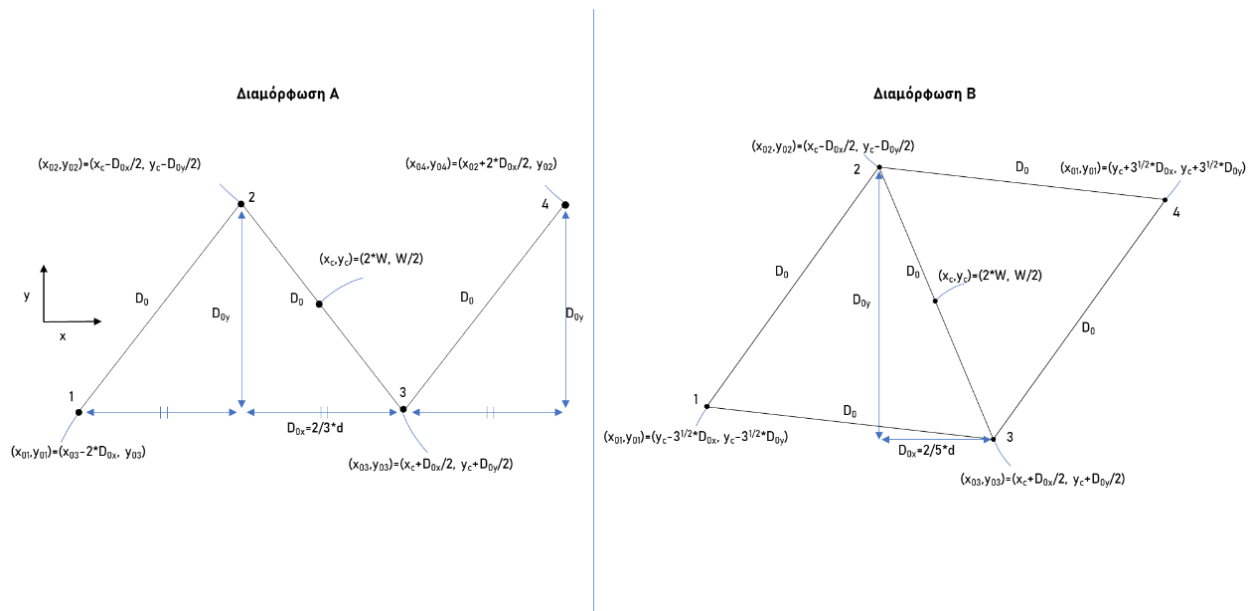
Εικόνα 3.13 Η αδιάστατη απόσταση, $D^*=D/d$ σε συνάρτηση με τον αδιάστατο χρόνο, $t^*=t/T$ για i) κυκλικούς δίσκους με αρχική απόσταση $D_0=d+d/24$ και ii) ελλειπτικούς δίσκους με $D_0=0.875*d$. Οι τιμές του k κυμαίνονται από 1-8.



Εικόνα 3.14 Γραμμικές σχέσεις των αδιάστατων τελικών αποστάσεων D^* σε σχέση με το λόγο ροής k . i) Κυκλικά σωματίδια & ii) ελλειπτικά σωματίδια.

3.2.3 Ταυτόχρονος διαχωρισμός και εστιασμός τεσσάρων σωματιδίων

Στο κεφάλαιο αυτό εξετάζεται πως ομάδες σωματιδίων συμπεριφέρονται μέσα σε μία διάταξη υδροδυναμικού εστιασμού. Συγκεκριμένα εξετάζεται η επίδραση που έχει στον διαχωρισμό η αλληλεπίδραση μεταξύ των παραπάνω σωματιδίων. Για το σκοπό αυτό θα εξεταστούν διάφορα αρχικά σενάρια με διαφορετικές αρχικές θέσεις και σχήματα σωματιδίων. Οι αρχικές θέσεις των σωματιδίων αυτών παρουσιάζονται αναλυτικά στην Εικόνα 3.15. Στη Διαμόρφωση A τα σωματίδια ισαπέχουν ως προς των άξονα των x με απόσταση D_{0x} ενώ έχουν απόσταση $D_{0y}/2$ από τον κεντρικό άξονα του αγωγού. Διαδοχικά σωματίδια βρίσκονται εναλλάξ κάτω και πάνω από τον άξονα αυτό. Στη διαμόρφωση B τα σωματίδια βρίσκονται στις γωνίες ενός ισόπλευρου παραλληλογράμμου, η διαγώνιος του οποίου ισούται με τις πλευρές του. Η αρχική θέση σωματιδίου i ($i=1-4$) συμβολίζεται με (x_{0i}, y_{0i}) . Ο λόγος ροής k είναι 4 για όλα τα σενάρια. Η απόσταση μεταξύ δύο σωματιδίων i, j ορίζεται ως $D(i, j)$. Η αδιαστατοποίηση όλων των αποστάσεων $D(i, j)$ γίνεται με την τιμή $d_0=400$ μm .



Εικόνα 3.15 Αρχικές θέσεις των σωματιδίων για τις διατάξεις που χρησιμοποιούνται.

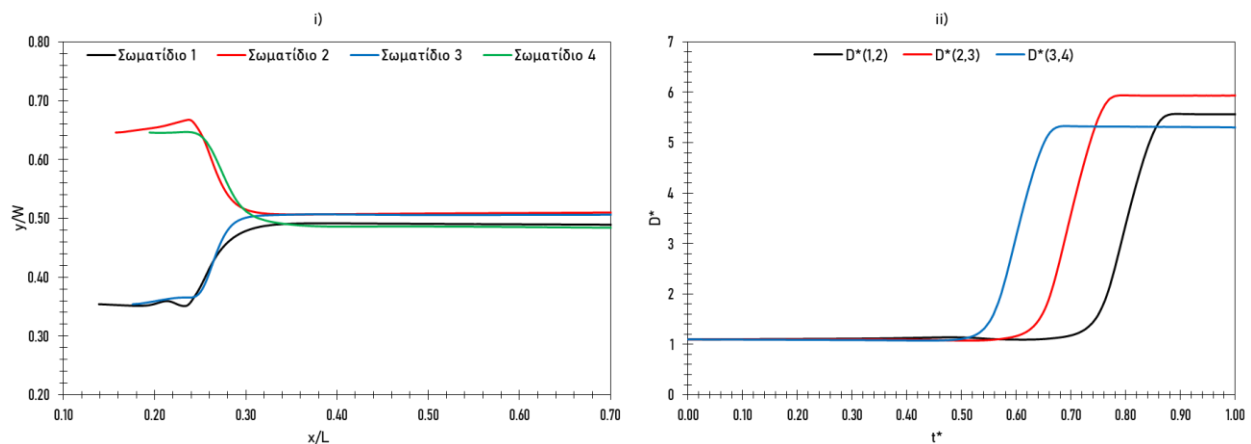
Εξετάζονται πέντε σενάρια A-E. Το Σενάριο A περιλαμβάνει μία προσομοίωση κυκλικών σωματιδίων στη Διάταξη A. Η αρχική απόσταση D_0 ισούται με $1,1 \cdot d$. Τα υπόλοιπα σενάρια χρησιμοποιούν τη Διάταξη B. Το Σενάριο B περιλαμβάνει μία σειρά πέντε προσομοιώσεων κάθε μία με διαφορετικό β . Αναφέρεται σε κυκλικά σωματίδια. Η αρχική τους απόσταση D_0 ισούται με $d + d_0/10$ που σημαίνει ότι εάν και η απόσταση αλλάζει από προσομοίωση σε προσομοίωση η απόσταση μεταξύ των επιφανειών των σωματιδίων παραμένει σταθερή. Τα σενάρια Γ και Δ περιλαμβάνουν από μία προσομοίωση το καθένα. Εξετάζουν τέσσερα διαφορετικά σωματίδια διαφορετικού β στην ίδια ροή δείγματος. Το Γ περιλαμβάνει σωματίδια μικρότερης και ίσης διαμέτρου από αυτά με $\beta=6$ ενώ το Δ περιλαμβάνει σωματίδια μεγαλύτερης και ίσης διαμέτρου. Τα σωματίδια είναι κυκλικά. Η αρχική απόσταση των σωματιδίων ισούται με $D_0 = \max(d_i)$ (όπου d_i η διάμετρος του σωματιδίου i). Το Σενάριο E περιλαμβάνει μία προσομοίωση ελλειπτικών σωματιδίων διαφορετικού λόγου διαστάσεων α αλλά ίδιου λόγου αποκλεισμού β . Τα ακριβή στοιχεία των σεναρίων αναγράφονται στον Πίνακα 3.7.

Πίνακας 3.7 Χαρακτηριστικά του κάθε σεναρίου

	Σενάριο A	Σενάριο B	Σενάριο Γ	Σενάριο Δ	Σενάριο E
Λόγος Διαστάσεων	$\alpha=1$	$\alpha=1$	$\alpha=1$	$\alpha=1$	$\alpha_1=6.85, \alpha_2=6, \alpha_3=8, \alpha_4=7$
Λόγος Αποκλεισμού	$\beta=6$	$\beta=4.5, 6, 7.5, 9, 10.5$	$\beta_1=6.85, \beta_2=6, \beta_3=8, \beta_4=7$	$\beta_1=5.5, \beta_2=5, \beta_3=4.5, \beta_4=6$	$\beta=6$
Λόγος Πυκνοτήτων	$\gamma=1.250$	$\gamma=1.250$	$\gamma=1.059$	$\gamma=1.059$	$\gamma=1.059$
Αρχικές Θέσεις	Διάταξη A	Διάταξη B	Διάταξη B	Διάταξη B	Διάταξη B

Αρχική Γωνία	-	-	-	-	$\theta_1=20^\circ, \theta_2=120^\circ,$ $\theta_3=160^\circ, \theta_4=45^\circ$
Αρχική Απόσταση	$D_0=1.1*d$	$D_0=d+d_0/10$	d_2	d_3	d

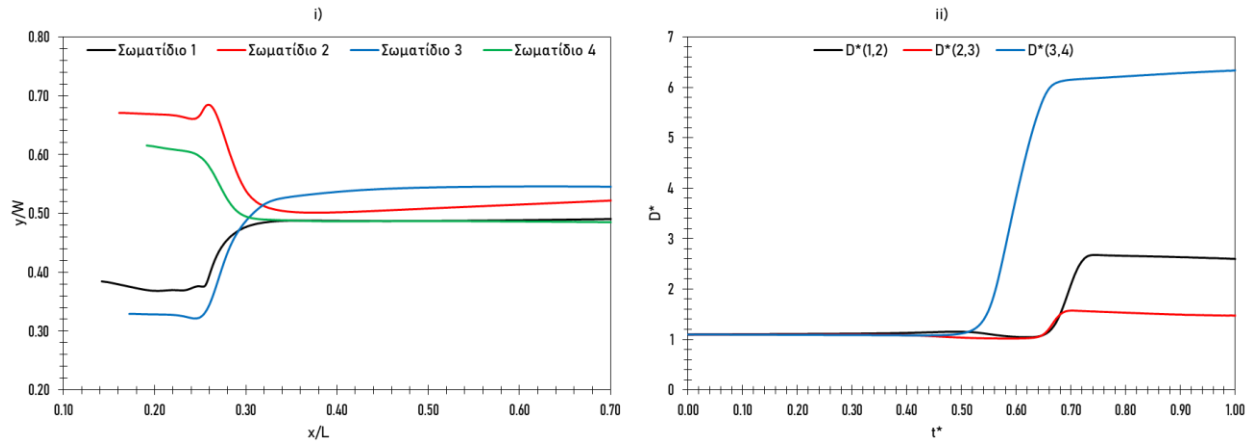
Αρχικά ακολουθεί η σύγκριση του Σεναρίου A και του Σεναρίου B για $\beta=6$. Η αρχική απόσταση και στις δύο περιπτώσεις είναι $D_0=1.1*d$. Στις Εικόνες 3.16 και 3.17 παρουσιάζονται οι τροχιές και οι αποστάσεις μεταξύ των διαδοχικών σωματιδίων για τα σενάρια A και B αντίστοιχα. Στο Σενάριο ο A ο εστιασμός είναι επιτυχής καθώς όλα τα σωματίδια φτάνουν κοντά στον κεντρικό άξονα του αγωγού. Παράλληλα τελική απόσταση διαδοχικών σωματιδίων κυμαίνεται σε κοντινές τιμές. Κατά συνέπεια η αλληλεπίδραση των σωματιδίων δεν εμποδίζει σημαντικά τους στόχους της διεργασίας. Αντίθετα στο Σενάριο B η αλληλεπίδραση παίζει σημαντικό ρόλο κατά τον υδροδυναμικό εστιασμό. Το σωματίδιο 3 ωθείται πάνω από τον κεντρικό άξονα του αγωγού χωρίς να εστιαστεί στον ίδιο βαθμό με τα υπόλοιπα σωματίδια παρόλο που βρίσκεται αρχικά πιο κοντά στον άξονα και κάτω από αυτόν. Συνάμα, ενώ το σωματίδιο 4 απομακρύνεται από τα άλλα σωματίδια στον ίδιο βαθμό περίπου με το σενάριο A, τα άλλα τρία σωματίδια παραμένουν πιο κοντά μεταξύ τους. Ειδικά τα σωματίδια 2, 3 διαχωριστήκαν σε ελάχιστο βαθμό. Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η αλληλεπίδραση των σωματιδίων παίζει σημαντικό ρόλο στον εστιασμό τους. Παράλληλα, φαίνεται ότι όταν ο αριθμός των σωματιδίων ανά όγκο ρευστού είναι μικρότερος (Διαμόρφωση B), ο υδροδυναμικός εστιασμός δυσχεραίνεται. Χρειάζονται υψηλότερες τιμές του k , για να επιτευχθεί ο εστιασμός και ο διαχωρισμός πολλαπλών σωματιδίων.



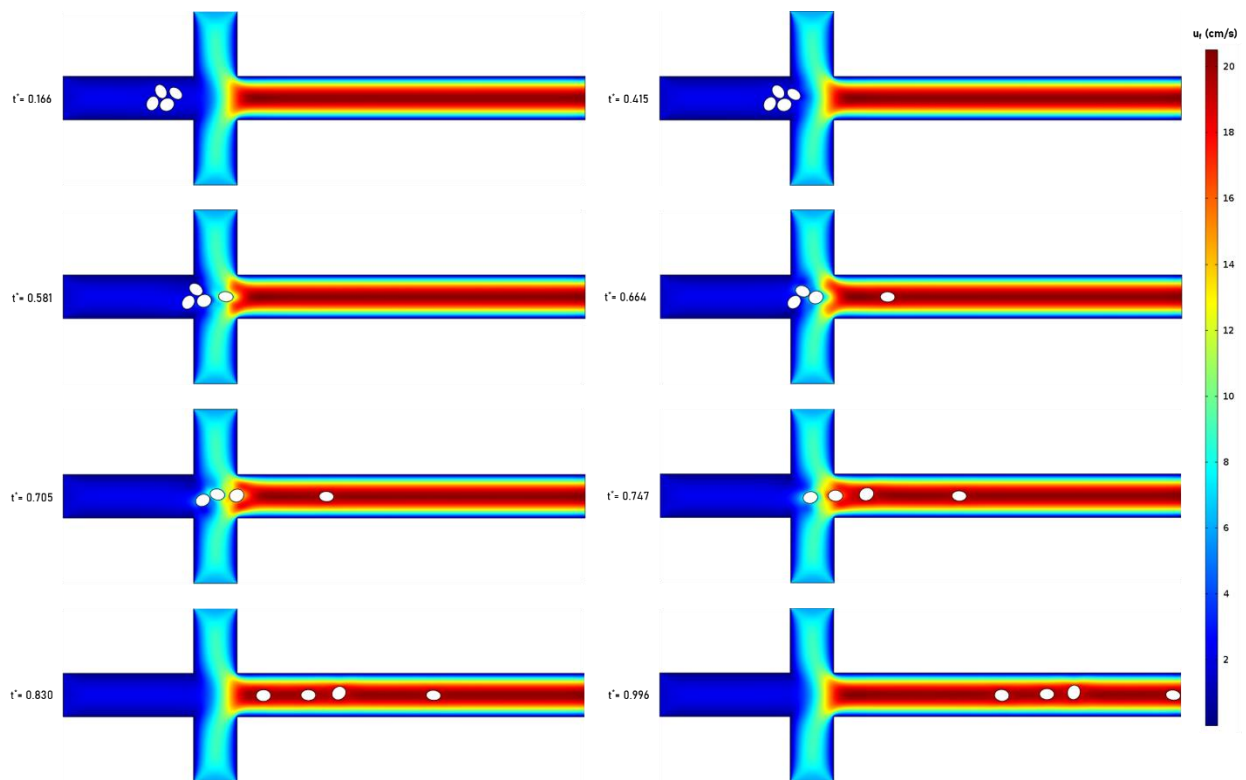
Εικόνα 3.16 Σενάριο A: i) Αδιάστατη τροχιά των σωματιδίων, ii) Αποστάσεις διαδοχικών σωματιδίων σε σχέση με τον αδιάστατο χρόνο

Όλα τα σενάρια με την Διαμόρφωση B έχουν παρόμοια συμπεριφορά με αυτή που περιγράφηκε παραπάνω. Στην Εικόνα 3.18 παρουσιάζονται στιγμιότυπα των ελλειπτικών σωματιδίων του Σεναρίου E. Βλέπουμε ότι ποιοτικά ο διαχωρισμός των δύο μεσαίων σωματιδίων είναι δύσκολος και ότι το σωματίδιο 3 πάλι είναι πάνω από το κεντρικό άξονα. Στην Εικόνα 3.19 παρουσιάζεται η αδιάστατη τελική απόσταση D^* των Σεναρίων i) B και ii) Γ,Δ,E αντίστοιχα. Στο Σενάριο B παρατηρούμε ότι όσο μικραίνουν τα σωματίδια η απόστασή μεταξύ τους τείνει να

μειώνεται. Παρόλα αυτά, η μείωση είναι όλο και μικρότερη μέχρι και που για $\beta > 7.5$ τείνει να γίνει αμελητέα. Κατά συνέπεια, ο διαχωρισμός μικρότερων σωματιδίων απαιτεί μεγαλύτερες τιμές του k . Ο ισχυρισμός ότι μικρότερα σωματίδια διαχωρίζονται δυσκολότερα επιβεβαιώνεται και από την σύγκριση των σεναρίων Γ και Δ .

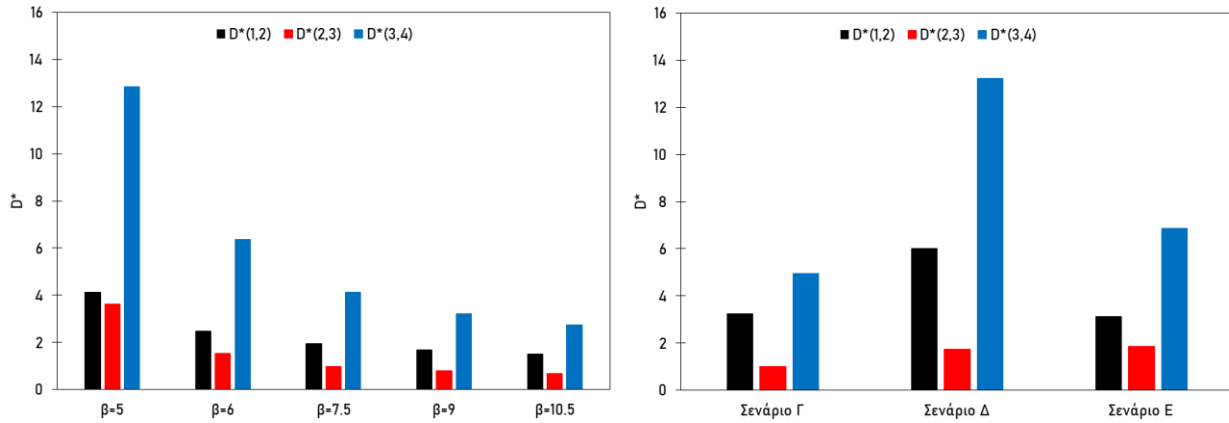


Εικόνα 3.17 Σενάριο $B(\beta=6)$: i) Αδιάστατη τροχιά των σωματιδίων, ii) Αποστάσεις διαδοχικών σωματιδίων σε σχέση με τον αδιάστατο χρόνο



Εικόνα 3.18 Στιγμιότυπα της κίνησης του Σεναρίου E για διάφορους αδιάστατους χρόνους t^* . Σενάριο E

Τέλος ακολουθεί η σύγκριση του Σεναρίου Β για $\beta=6$ με το Ε. Και στα δύο αυτά σενάρια οι αρχικές θέσεις και αποστάσεις των σωματιδίων είναι σχεδόν οι ίδιες $(d, 1, 1d)$. Οι τελικές αδιάστατες αποστάσεις μεταξύ των αντίστοιχων σωματιδίων σε κάθε σενάριο είναι περίπου ίσες. Αυτό σημαίνει ότι τα ελλειπτικά σωματίδια διαχωρίζονται εξίσου εύκολα με τα κυκλικά.



Εικόνα 3.19 Αδιάστατη τελική απόσταση για τα Σενάρια i) Β και i) Γ,Δ,Ε.

4 Σύνοψη και Συμπεράσματα

Σε αυτήν την εργασία παρουσιάστηκε ένα υπολογιστικό μοντέλο για την προσομοίωση της κίνησης των σωματιδίων σε μια διάταξη υδροδυναμικού εστιασμού. Σε όλες τις προηγούμενες αριθμητικές μελέτες υδροδυναμικού εστιασμού των μικροσωματιδίων, οι εξισώσεις για την κίνηση της στερεάς φάσης δεν περιλαμβάνονται στην προτεινόμενη διατύπωση. Στην περίπτωση μας, το ογκομετρικό κλάσμα των νησίδων είναι σημαντικό και έτσι το υγρό του δείγματος δεν μπορεί να θεωρηθεί ομοιογενές. Από όσο γνωρίζουμε, αυτή είναι η πρώτη φορά που ένα αριθμητικό μοντέλο μπορεί να προβλέψει την μεταφορική και περιστροφική κίνηση σωματιδίων κατά τον υδροδυναμικό εστιασμό. Με την χρήση επεξεργασίας εικόνων, το σχήμα των σωματιδίων εξάγεται από εικόνες μικροσκοπίου. Εξετάστηκε, δισδιάστατη γεωμετρία κάθετης διασταύρωσης καναλιών σε σχήμα σταυρού. Οι εξισώσεις κίνησης ρευστού και σωματιδίων επιλύθηκαν με την εφαρμογή φορμαλισμού πεπερασμένων στοιχείων και την τεχνική κινούμενου πλέγματος ALE. Έχοντας επαληθεύσει τη μεθοδολογία μας με βάση τη διεθνή βιβλιογραφία, πραγματοποιήσαμε προσομοιώσεις με σφαιρικά και ελλειπτικά σωματίδια.

Από τα αποτελέσματα των αριθμητικών προσομοιώσεων μπορούμε να συμπεράνουμε ότι ο υδροδυναμικός εστιασμός είναι μία αποτελεσματική μέθοδος διαχωρισμού και εστιασμού σωματιδίων με υψηλές τιμές του β . Τα αποτελέσματα συνοψίζονται παρακάτω.

- Ο κυριότερος παράγοντας που επηρεάζει την αποτελεσματικότητα μίας συσκευής υδροδυναμικού εστιασμού είναι ο λόγος ροής k . Η επίδραση του k μελετήθηκε αρχικά για ένα σωματίδιο. Η αύξηση της τιμής του k αποφέρει βελτίωση στην αποτελεσματικότητά του υδροδυναμικού εστιασμού. Για μεγαλύτερες τιμές του k όμως, ο εστιασμός βελτιώνεται με μειούμενο ρυθμό. Παρόλα αυτά η τιμή του $k=10$ φαίνεται να επαρκεί για τον εστιασμό των σωματιδίων ανεξάρτητα της αρχικής τους θέσης. Ένας άλλος παράγοντας που μελετήθηκε για ένα σωματίδιο είναι η μορφολογία του, και συγκεκριμένα η τιμή του α . Αύξηση του α φαίνεται να επιφέρει μικρή αύξηση της τελικής ταχύτητας, με αυτή να τείνει να σταθεροποιηθεί για μεγάλες τιμές του ($\alpha>3.5$).
- Στη συνέχεια εξετάστηκε η συμπεριφορά δύο σωματιδίων με διάφορες αρχικές θέσεις και αποστάσεις. Κατά τον διαχωρισμό, η τελική απόσταση δύο σωματιδίων αυξάνεται γραμμικά με το λόγο ροών k για όλες τις αρχικές θέσεις. Ακόμη, για δύο σωματίδια στον άξονα του αγωγού, ο λόγος μίας τελικής απόστασης για οποιοδήποτε k προς την τελική απόσταση για $k=1$ ακολουθεί την ίδια γραμμική σχέση ανεξαρτήτως της αρχικής απόστασης. Όσον αφορά δύο σωματίδια με μικρή απόσταση μεταξύ τους, αυτά μπορούν να διαχωριστούν αυξάνοντας την τιμή του k .
- Τέλος, διεξάχθηκαν προσομοιώσεις με πολλαπλά σωματίδια. Η αλληλεπίδραση μεταξύ πολλών σωματιδίων δυσχεραίνει το διαχωρισμό και τον εστιασμό τους. Ανάλογα με την αρχική διάταξη, η συμπεριφορά των σωματιδίων αλλάζει. Αυτό δείχνει ότι ο αριθμός των σωματιδίων ανά όγκο ρευστού παίζει σημαντικό ρόλο στον υδροδυναμικό εστιασμό.
- Το μέγεθος των σωματιδίων παίζει επίσης σημαντικό ρόλο στον διαχωρισμό, καθώς μικρότερα σωματίδια διαχωρίζονται πιο δύσκολα. Η επίδραση που έχει το β τείνει να εξαλειφθεί όμως για $\beta>9$. Ο λόγος διαστάσεων α από την άλλη πλευρά, δεν επηρεάζει

σημαντικά τον εστιασμό και το διαχωρισμό. Στα σενάρια όπου ελλειπτικά και κυκλικά σωματίδια είχαν τις ίδιες αρχικές συνθήκες τα αποτελέσματα ήταν πανομοιότυπα.

Για την επιπλέον πρόοδο της ερευνάς που διεξάχθηκε προτείνεται η βελτίωση του μοντέλου ώστε να μπορεί να διαχειριστεί παραπάνω σωματίδια. Μία έλλειψη του μοντέλου αυτή τη στιγμή είναι η αδυναμία του να διαχειριστεί συγκρούσεις μεταξύ σωματιδίων. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα οι διαρρυθμίσεις των σωματιδίων που μπορούν να εξεταστούν να είναι περιορισμένες. Η δυνατότητα του μοντέλου να διαχειριστεί συγκρούσεις θα επέτρεπε την μελέτη τυχαίων διαρρυθμίσεων με συγκεκριμένο ογκομετρικό κλάσμα σωματιδίων ρευστού. Μία τέτοια προσομοίωση θα επέτρεπε να βρεθεί για παράδειγμα η σχέση του λόγου ροής με την μέση τελική απόσταση των σωματιδίων για διάφορα ογκομετρικά κλάσματα.

Παράλληλα, θα μπορούσαν να εξεταστούν και άλλες γεωμετρίες. Για παράδειγμα, η επίδραση που έχει η γωνία εισόδου των δύο καναλιών που φέρουν το υγρό θήκης είναι μία παράμετρος που δεν διερευνήθηκε στα πλαίσια αυτής της εργασίας.

5 Βιβλιογραφία

- [1] J. P. Golden, G. A. Justin, M. Nasir and F. S. Ligler, "Hydrodynamic focusing – a versatile tool," *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, vol. 402, no. 1, pp. 325-335, 2011.
- [2] I. Psychogios and D. T. Hatzivramidis, "Two-nozzle hydrodynamic focusing," *Chemical Engineering Science*, vol. 123, pp. 429-435, 2015.
- [3] G. Lee, C. Lin and S. Chang, "Micromachine-Based Multi-Channel Flow Cytometers for Cell/Particle Counting and Sorting," *Journal of Micromechanics and Microengineering*, vol. 15, no. 3, p. 447–454, 2004.
- [4] L. Shiang-Chi, Y. Pei-Wen, P. Chien-Chung and T. Yi-Chung, "Single channel layer, single sheath-flow inlet microfluidic flow cytometer with three-dimensional hydrodynamic focusing," *Lab Chip*, vol. 12, no. 17, p. 3135–3141, 2012.
- [5] S. Tripathi, A. Kumar, Y. V. Bala, V. Kumar and A. Agrawa, "Three-dimensional hydrodynamic flow focusing of dye, particles and cells in a microfluidic device by employing two bends of opposite curvature," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 20, no. 34, 2016.
- [6] X. Mao, S. S. Lin, C. Dong and T. J. Huang, "Single-layer planar on-chip flow cytometer using microfluidic drifting based three-dimensional (3D) hydrodynamic focusing," *Lab on a Chip*, vol. 9, pp. 1583-1589, 2009.
- [7] M. Zhang, Y. Lian, C. Harnett and E. Brehob, "Investigation of Hydrodynamic Focusing in a Microfluidic Coulter Counter Device," *Journal of Biomechanical Engineering*, vol. 134, no. 8, 2012.
- [8] F. F. Mandy, M. Bergeron and T. Minkus, "Principles of flow cytometry," *Transfusion Science*, vol. 16, pp. 303-314, 1995.
- [9] M. Brown and C. Wittwer, "Flow Cytometry: Principles and Clinical Applications in Hematology," *Clinical Chemistry*, vol. 46, no. 8, p. 1221–1229, 2000.
- [10] I. V. Zhigaltsev, N. Belliveau, I. Hafez, A. K. K. Leung, J. Huft, C. Hansen και P. R. Cullis, «Bottom-up design and synthesis of limit size lipid nanoparticle systems with aqueous and triglyceride cores using millisecond microfluidic mixing,» *Langmuir*, τόμ. 28, p. 3633–3640, 2012.
- [11] R. Karnik, F. Gu, P. Basto, C. Cannizzaro, L. Dean, W. Kyei-Manu, R. Langer and O. C. Farokhzad, "Microfluidic platform for controlled synthesis of polymeric nanoparticles," *Nano Letters*, vol. 8, p. 2906–2912, 2008.
- [12] M. Lu, A. Ozcelika, C. L. Grigsby, Y. Zhao, F. Guo, K. W. Leong and T. J. Huang, "Microfluidic hydrodynamic focusing for synthesis of nanomaterials," *NanoToday*, vol. 11, no. 6, pp. 778-792, 2016.

- [13] D. T. Hatzivramidis, M. T. Karatzas and G. P. Chrousos, "Pancreatic islet cell transplantation: an update," *Annals of Biomedical Engineering*, vol. 41, no. 3, p. 469–476, 2013.
- [14] A. A. Johnson and T. E. Tezduyar, "Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures," *Int. J. Multiphase Flow*, vol. 22, no. 2, pp. 335-352, 1996.
- [15] H. H. Hu, D. D. Joseph and M. J. Crochet, "Direct Simulation of Fluid Particle Motions," *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, vol. 3, no. 5, pp. 285-306, 1992.
- [16] H. H. Hu, "Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures," *Int. J. Multiph. Flow*, vol. 22, no. 2, p. 335–352, 1996.
- [17] J. Feng, H. H. Hu and D. D. Joseph, "Direct Simulation of Initial Value Problems for the Motion of Solid Bodies in a Newtonian Fluid Part 1. Sedimentation," *J. Fluid Mech.*, vol. 261, p. 95–134, 1994.
- [18] R. Glowinski, T. W. Pan, T. I. Hesla, D. D. Joseph και J. Periaux, «A Fictitious Domain Approach to the Direct Numerical Simulation of Incompressible Viscous Flow past Moving Rigid Bodies: Application to Particulate Flow,» *Journal of Computational Physics*, τόμ. 169, αρ. 2, p. 363–426, 201.
- [19] P. Singh, D. D. Joseph, T. I. Hesla and T. P. R. Glowinski, "A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for viscoelastic particulate flows," *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, vol. 91, pp. 165-188, 2000.
- [20] S. Doolen and D. C. G., "Lattice Boltzmann method for fluid flows," *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 30, no. 1, p. 329–364, 1998.
- [21] A. J. C. Ladd and R. Verberg, "Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions," *J. Stat. Phys.*, vol. 104, no. 5-6, p. 1191–1251, 2001.
- [22] N. Q. Nguyen and A. J. C. Ladd, "Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions," *Phys. Rev. E*, vol. 66, no. 4, 2018.
- [23] Z. Feng and E. E. Michaelides, "Immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid – particles interaction problems," *J. Comput. Phys.*, vol. 195, no. 2, p. 602–628, 2004.
- [24] Z. Xia, K. Connington, S. Rapaka and P. Yue, "Flow patterns in the sedimentation of an elliptical particle," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 65, pp. 249-272, 2009.
- [25] R. Lehmann, R. A. Zuellig, P. Kugelmeier, P. B. Baenninger, W. Moritz, A. Perren, P. Clavien, M. Weber and G. A. Spinas, "Superiority of Small Islets in Human Islet Transplantation," *Diabetes*, vol. 56, no. 3, pp. 594-603, 2007.
- [26] D. Bosco, M. Armanet, P. Morel, N. Niclauss, A. Sgroi, Y. D. Muller, L. Giovannoni, G. Parnaud and T. Berney, "Unique arrangement of alpha- and beta-cells in human islets of Langerhans," *Diabetes*, vol. 59, no. 5, pp. 1202-1210, 2010.

- [27] R. S. Heller, "The Comparative Anatomy of Islets," in *Islets of Langerhans*, Dordrecht, Springer, 2014, pp. 1-18.
- [28] C. Dai, M. B. Y. Hang, C. Thompson, G. Poffenberger, A. Shostak, Z. Chen, R. Stein and A. C. Powers, "Islet-enriched gene expression and glucose-induced insulin secretion in human and mouse islets," *Diabetologia*, vol. 55, no. 3, p. 707–718, 2012.
- [29] H. David, J. Svihlik, J. Schier, M. Cahova, P. Girman, K. Zacharovova, Z. Berkova, J. Kriz, E. Fábryová, L. Kosinová, Z. Papackova, J. Kybic and F. Saudek, "Automated Analysis of Microscopic Images of Isolated Pancreatic Islets," *Cell Transplant*, vol. 25, no. 12, pp. 2145-2156, 2016.
- [30] J. Donea, A. Huerta, J. Ponthot και A. Rodríguez-Ferran, «Arbitrary Lagrangian – Eulerian Methods,» σε *Encyclopedia of Computational Mechanics*, Wiley , 2004, pp. 413-437.
- [31] H. H. Hu, N. A. Patankar and M. Y. Zhu, "Direct Numerical Simulations of Fluid–Solid Systems Using the ArbitraryLagrangian–Eulerian Technique," *Journal of Computational Physics*, vol. 169, no. 2, pp. 427-462, 2001.

