Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ



Εργαστήριο Βιορευστομηχανικής & Βιοϊατρικής Τεχνολογίας

# <u>Διπλωματική Εργασία</u>

## ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΔΙΕΣΠΑΡΜΕΝΩΝ ΣΕ ΥΓΡΟ ΡΕΟΝ ΜΕΣΟ ΥΠΟ ΤΗΝ ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΕΞΩΤΕΡΙΚΩΝ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΠΕΔΙΩΝ

## ΒΟΥΛΓΑΡΗΣ ΙΑΣΩΝ

Επιβλέπων: Καθηγητής ΤΣΑΓΓΑΡΗΣ ΣΩΚΡΑΤΗΣ

ΑΘΗΝΑ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2012

Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ



Εργαστήριο Βιορευστομηχανικής & Βιοϊατρικής Τεχνολογίας

# <u>Διπλωματική Εργασία</u>

## ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΔΙΕΣΠΑΡΜΕΝΩΝ ΣΕ ΥΓΡΟ ΡΕΟΝ ΜΕΣΟ ΥΠΟ ΤΗΝ ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΕΞΩΤΕΡΙΚΩΝ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΠΕΔΙΩΝ

## ΒΟΥΛΓΑΡΗΣ ΙΑΣΩΝ

## Τριμελής εξεταστική επιτροπή

Σ. Τσαγγάρης, Καθ. ΕΜΠ (επιβλέπων)
 Χρ. Προβατίδης, Καθ. ΕΜΠ
 Λ. Αλεξόπουλος, Λέκτορας ΕΜΠ

ΑΘΗΝΑ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2012

## Περίληψη

Η χρήση μαγνητικών μικρο- και νανο-σωματιδίων στην Ιατρική παρουσιάζει αυξημένο επιστημονικό ενδιαφέρον εξαιτίας των επιθυμητών χαρακτηριστικών τους. Παράλληλα καθώς ο ρόλος των μαγνητικών σωματιδίων στις βιοϊατρικές εφαρμογές γίνεται σημαντικότερος, αναπτύχθηκε και η μαθηματική και υπολογιστική μοντελοποίηση των εφαρμογών αυτών.

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε αριθμητικά, με τεχνικές της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής η ροή και η εναπόθεση μαγνητικών σωματιδίων που βρίσκονται διασκορμπισμένα εντός ρέοντος υγρού υπό την επίδραση εξωτερικών μαγνητικών πεδίων. Συγκεκριμένα, υπολογίστηκαν το κλάσμα εναπόθεσης, οι τροχιές και η συγκέντρωση των σωματιδίων σε ευθύγραμμους αγωγούς επιλύοντας την εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων σε περιγραφή κατά Euler. Η εξίσωση μεταφοράς περιγράφει τη συναγωγή και διάχυση των σωματιδίων και λαμβάνει υπόψη την επίδραση της αδράνειας των σωματιδίων, της βαρύτητας, αλλά και των μαγνητικών δυνάμεων που ασκούνται σε αυτά.

Για την εύρεση των πεδίων πίεσης και ταχύτητας της ροής του υγρού χρησιμοποιείται υπάρχων υπολογιστικός κώδικας, οποίος επιλύει τις εξισώσεις Navier-Stokes για ασυμπίεστο, Νευτώνειο ρευστό και βασίζεται σε μεθοδολογία πεπερασμένων όγκων. Με την ίδια μεθοδολογία αντιμετωπίζεται και η επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων, όπου χρησιμοποιείται επίσης υπάρχων κώδικας, στον οποίο προστέθηκαν νέες υπορουτίνες που περιγράφουν το μαγνητικό πεδίο ανάλογα με την εφαρμογή.

Στα αριθμητικά πειράματα που διεξήχθησαν στην παρούσα εργασία εξετάστηκε πως επηρεάζεται η μεταφορά και εναπόθεση των μαγνητικών σωματιδίων από τη μεταβολή διαφόρων παραμέτρων: η προέλευση του μαγνητικού πεδίου (σιδηρομαγνητικά καλώδια διαφόρων διατάξεων, ακτίνων και υλικών,ή κυλινδρικός σε διάφορες αποστάσεις), η ένταση του μαγνητικού πεδίου, οι ιδιότητες της ροής (ταχύτητα ροής, ιξώδες και πυκνότητα υγρού) και το μέγεθος των σωματιδίων.

Τα αποτελέσματα του πλήρως Eulerian μοντέλου συγκρίθηκαν με πειραματικά δεδομένα αλλά και αποτελέσματα άλλων υπολογιστικών εργασιών που βρέθηκαν στη βιβλιογραφία. Διαπιστώθηκε ότι το μοντέλο περιγράφει με απόλυτη επιτυχία τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων υπό την επίδραση εξωτερικών μαγνητικών πεδίων. Ωστόσο, παρατηρείται μια συστηματική υποτίμηση του κλάσματος εναπόθεσης που υπολογίζεται στην παρούσα εργασία σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα. Η απόκλιση αυτή μειώνεται καθώς η ταχύτητα ροής μειώνεται ή/και η ένταση του μαγνητικών δυνάμεων. Θεωρούμε ότι η διαφοροποίηση μπορεί να οφείλεται σε κάποιο μηχανισμό εναπόθεσης στο υγρό μέσο που δε συμπεριλήφθηκε στο μοντέλο, στον απλουστευμένο αναλυτικό τύπο μαγνήτισης των καλωδίων ή στις εσωτερικές διεργασίες των σωματιδίων, οι οποίες δε λήφθηκαν υπόψη.

### Abstract

Modeling of transport and deposition of particles dispersed in flowing liquid under the influence of external magnetic fields.

The use of magnetic micro- and nano-particles in medicine shows increased scientific interest due to their favorable characteristics. As the role of magnetic particles in biomedical applications becomes more important, the mathematical and computational modeling of these applications is developed.

In this work, the flow and deposition of magnetic particles, dispersed in a flowing liquid, under the influence of external magnetic fields is studied, using Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques. Specifically, the deposition fraction, trajectories and concentration of the particles in straight tubes are calculated by solving the particle transport equation in Eulerian description. The transport equation describes the convection and diffusion of particles and takes into account the effects of inertia, gravity and external magnetic forces.

In order to calculate the pressure and velocity fields of the flowing liquid an existing CFD code is used, which solves the Navier-Stokes equations for incompressible, Newtonian fluid and is based on a finite volume method. The same methodology was used to solve the particle transport equation, also using an existing code, in which new subroutines describing the magnetic field of each application are added.

In the numerical experiments conducted in this work the effect of various parameters in the transport and deposition of the magnetic particles is examined; the source of the magnetic field (ferromagnetic wires with various configurations, radii and materials, or cylindrical magnet at different distances), the magnetic flux density of the field, the properties of the flow (flow velocity, viscosity and density of the fluid) and particle size.

The results of the fully Eulerian model were compared to experimental data and findings of other computational works found in literature. It was found that the model successfully describes the qualitative characteristics of the transport and deposition of particles under the influence of external magnetic fields. However, there is a systematic underestimation of the deposition fraction, calculated in this work, compared to the experiments. This deviation decreases as the flow velocity decreases and/or the intensity of the magnetic field increases, i.e. as the effect of magnetic forces becomes more important. It is assumed that the differences may be due to some deposition mechanism in liquid medium present in the experiments, which is not included in the model, the simplified analytical expression for the magnetization of the wires, or the internal processes of the particles, which were not taken into account.

# Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή		
2	Θεωρία και περιγραφή μοντέλου		17
2.	1 Σ	Συνεχής φάση	
	2.1.1	Εξισώσεις	17
	2.1.2	Αριθμητική επίλυση	18
2.	2 Σ	ωματιδιακή φάση	19
	2.2.1	Γενική Δυναμική Εξίσωση	19
2.2.2		Μηχανισμοί εναπόθεσης	21
	2.2.3	Μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων	24
	2.2.4	Οριακές συνθήκες	26
	2.2.5	Αριθμητική επίλυση	27
3	Στοιχεία μαγνητισμού		29
3.	1. N	/Ιαγνητική δύναμη σε σωματίδια	29
3.2		ραμμικό μοντέλο μαγνήτισης	30
3.3 Y		′περ-παραμαγνητικό μοντέλο μαγνήτισης	32
3.	4 N	Λαγνητικά πεδία	34
3.	5 N	/Ιαγνητική ταχύτητα σωματιδίου	40
3.	6 E	Εξίσωση μεταφοράς στη μαγνητοφόριση	41
4	Εφαρ	μογές	43
4.	1 N	/Ιαγνητικό πεδίο παραγόμενο από διατάξεις FM καλωδίων	43
	4.1.1	Δύο σιδηρομαγνητικά καλώδια	43
	4.1.2	Τέσσερα σιδηρομαγνητικά καλώδια (δύο διατάξεις)	50
4.	2 N	/Ιαγνητικό πεδίο από κυλινδρικό μαγνήτη απείρου μήκους	58
5	Συμπεράσματα		

Παράρτημα	71
Βιβλιογραφία	77

## 1 Εισαγωγή

Την τελευταία δεκαετία με τις μεγάλες εξελίξεις στον τομέα της νανοτεχνολογίας υπάρχει αυξημένο ενδιαφέρον για τη χρήση μαγνητικών νανοσωματιδίων (Magnetic NanoParticles - MNPs) σε ένα ευρύ φάσμα βιοϊατρικών εφαρμογών, καθώς εμφανίζουν πολλά θετικά χαρακτηριστικά. Τα MNPs μπορούν να συνδεθούν με φάρμακα, πρωτεΐνες, ένζυμα, αντισώματα, νουκλεοτίδια και μετά να κατευθυνθούν μέσω εξωτερικών μαγνητικών πεδίων σε ένα όργανο ή ιστό ή να θερμανθούν από ένα μεταβαλλόμενο μαγνητικό πεδίο για θεραπείες υπερθερμίας (Gupta and Gupta 2005).

Υπερ-παραμαγνητικά νανοσωματίδια νωὶδι330 TOU σιδήρου (SuperParamagnetic Iron Oxide Nanoparticles-SPION) μετά από κατάλληλη χημική επεξεργασία έχουν χρησιμοποιηθεί ευρέως σε πολυάριθμες in vivo εφαρμογές, όπως για παράδειγμα η βελτίωση της τεχνικής της μαγνητικής τομογραφίας, η αποκατάσταση ιστών, ανοσολογικές δοκιμές, η αποτοξίνωση βιολογικών υγρών, η υπερθερμία, η μεταφορά φαρμάκων και ο διαχωρισμός κυττάρων. Όλες αυτές οι βιοϊατρικές και βιομηχανικές εφαρμογές προϋποθέτουν ότι τα νανοσωματίδια διαθέτουν υψηλές τιμές μαγνήτισης και μέγεθος μικρότερο από 100 nm με συνολικά μικρό εύρος μεγεθών, ώστε να διαθέτουν ομοιόμορφες φυσικές και χημικές ιδιότητες. Επιπρόσθετα, αυτές οι εφαρμογές απαιτούν ειδική επίστρωση επιφάνειας για τα μαγνητικά σωματίδια, η οποία δεν αρκεί μόνο να είναι μη-τοξική και βιοσυμβατή αλλά και να επιτρέπει τη στοχευμένη μεταφορά σε μια συγκεκριμένη περιοχή. Όσον αφορά το συγκεκριμένο αυτό κομμάτι, η μελέτη έχει επικεντρωθεί στη βελτίωση της βιοσυμβατότητας των υλικών, ενώ αντίθετα λίγες έρευνες και εξελίξεις υπάρχουν σχετικά με τη βελτίωση της ποιότητας των μαγνητικών σωματιδίων, την κατανομή μεγέθους τους, το σχήμα και την επιφάνεια τους, καθώς επίσης και τη δημιουργία ενός πρωτοκόλλου για τον ποιοτικό τους έλεγχο. Η φύση των επιστρώσεων επιφάνειας και η γεωμετρική τους διευθέτηση πάνω στα νανοσωματίδια δεν καθορίζουν μόνο το συνολικό μέγεθος του κολλοειδούς, αλλά παίζουν ακόμα σημαντικό ρόλο στη βιοκινητική και στη βιοκατανομή των νανοσωματιδίων μέσα στον οργανισμό. Τα είδη της ειδικής επίστρωσης εξαρτώνται από την εφαρμογή κάθε φορά.

Ανάμεσα στις διάφορες προτεινόμενες βιοϊατρικές χρήσεις των MNPs, υπάρχουν εφαρμογές που σχετίζονται με τη διάγνωση και θεραπεία του каркívou (Cengelli et al. 2010; Grimm and Scheinberg 2011; Grobmyer et al. 2011; Prijic and Sersa 2011; Yallapu et al. 2011). Η ραγδαία ανάπτυξη τεχνικών που επιτρέπουν τη σύνθεση και το χειρισμό νανοσωματιδίων, όπως επίσης και η ανάπτυξη νέων νανο-υλικών αναμένεται να παίξει σημαντικό ρόλο στη στοχευμένη διάγνωση και θεραπεία του καρκίνου. Οι στοχευμένοι νανομεταφορείς αποτελούν ένα ενδιαφέρον μέσο επιλεγμένης μεταφοράς υψηλής συγκέντρωσης κυτταροτοξικών παραγόντων ή μέσων απεικόνισης κατευθείαν στο σημείο του καρκίνου. Μάλιστα, υπάρχουν νανοσωματιδιακές συνθέσεις που επιτρέπουν ταυτόχρονη απεικόνιση και θεραπεία (theranostics), λύνοντας έτσι προβλήματα διαλυτότητας και μη επιθυμητής βιοκατανομής των δραστικών ουσιών που μπορούν να οδηγήσουν σε αύξηση των ανεπιθύμητων ενεργειών. Σε ότι αφορά τον καρκίνο του μαστού, για

παράδειγμα, η θεραπεία του έχει σημαντικές παρενέργειες και δεν είναι πάντα επιτυχής. Χάρη στην εξέλιξη της νανοτεχνολογίας υπάρχουν σημαντικές ελπίδες για βελτίωση της διάγνωσης και θεραπείας του καρκίνου αυτού του τύπου, η οποία θα περιλαμβάνει μη-επεμβατική θεραπεία, παρακολούθηση της αντίδρασης στη θεραπεία, εξελιγμένη απεικόνιση και αντιμετώπιση των μεταστάσεων.

Εφαρμογές των MNPs υπάρχουν και σε θεραπείες με βλαστικά κύτταρα (lancu et al. 2009). Τα βλαστικά κύτταρα θεωρούνται ότι προσφέρουν δυνατότητες για τη θεραπεία ασθενειών, όπως ο σακχαρώδης διαβήτης, η αρθρίτιδα, η κίρρωση του ήπατος, διάφορες βλάβες στο μυελό των οστών, η νόσος Alzheimer, χάρη στη μοναδική τους ιδιότητα να διαφοροποιούνται σε πολλές κυτταρικές σειρές και ιστούς και στη συνέχεια να ενσωματώνονται ομαλά στον κατεστραμμένο ή άρρωστο ιστό. Για αυτό το λόγο μελετάται παγκοσμίως η παραγωγή εξελιγμένων θεραπευτικών συστατικών για ανίατες ασθένειες, συνδυάζοντας τις μοναδικές ιδιότητες των νανοσωματιδίων και των βλαστικών κυττάρων.

Τα νανοσωματίδια μπορούν να χρησιμοποιηθούν, ακόμα, σε προηγμένα συστήματα μεταφοράς φαρμάκων (Neuberger et al. 2005; Duran et al. 2008; Kumar et al. 2010). Μεγάλο πρόβλημα όσον αφορά τη φαρμακευτική θεραπεία είναι η δυσκολία να μεταφερθούν οι δραστικές ουσίες σε συγκεκριμένους ιστούς, χωρίς να προκληθεί τοξικότητα σε άλλους. Η ανάπτυξη των MNPs, αλλά και τεχνικών για την ασφαλή μεταφορά και συγκέντρωσή τους σε συγκεκριμένα σημεία μέσα στο σώμα συνιστά πολύτιμο εργαλείο για τη φαρμακευτική θεραπεία. Τα συστήματα μεταφοράς φαρμάκων είναι κολλοειδείς διασπορές από σύνθετα νανοσωματίδια αποτελούμενα από μία βιοσυμβατή μήτρα και μαγνητικά στοιχεία, σχεδιασμένα να μεταφέρουν θεραπευτικές ουσίες. Η μήτρα μαζί με τα πολυμερή και τους πολυηλεκτρολύτες που απορροφούνται, παρέχει στο σύστημα επιπλέον κολλοειδή σταθερότητα και κατ' επέκταση έλεγχο της ανοσολογικής αντίδρασης. Τα μαγνητικά στοιχεία, από την άλλη, παρέχουν την απαραίτητη μαγνητική καθοδήγηση. Πολύ υποσχόμενα για αυτές τις εφαρμογές είναι τα SPIONs που αναφέρθηκαν και παραπάνω, τα οποία και κατευθύνονται με εξωτερικούς μαγνήτες. Τα SPIONs επικαλύπτονται με βιοσυμβατά υλικά και μπορούν να συνδεθούν με φάρμακα, πρωτεΐνες ή πλασμίδια.

Τέλος, πολλές πόρτες ανοίγουν και στο πεδίο της ιατρικής απεικόνισης (Lanza et al. 2004; Sharma et al. 2006; Thorek et al. 2006; Sharma and Kwon 2007; Nahrendorf et al. 2008; Slevin et al. 2010). Οι μοριακοί παράγοντες απεικόνισης επεκτείνουν τις δυνατότητες της μη-επεμβατικής ιατρικής διάγνωσης από βασικές ακαθόριστες ανατομικές περιγραφές σε πιο πολύπλοκους φαινοτυπικούς χαρακτηρισμούς, αναγνωρίζοντας τις μοναδικές κυτταρικές βιοχημικές υπογραφές στις επιφάνειες. Η μοριακή απεικόνιση είναι πλέον σημαντικό κομμάτι των περισσοτέρων κλινικών μεθόδων απεικόνισης και ιδιαίτερα της μαγνητικής τομογραφίας (Magnetic Resonance Imaging-MRI). Ο συνδυασμός υψηλής ανάλυσης μοριακής μαγνητικής τομογραφίας με τη μεταφορά φαρμάκων αναμένεται να διευκολύνει τον έλεγχο της θεραπείας (στοχευμένη θεραπεία) και να προσφέρει νέες κλινικές προσεγγίσεις σε πολλές ασθένειες. Οι εφαρμογές εκτείνονται από τον εντοπισμό

φλεγμονωδών νόσων, μέσω της συσσώρευσης μη-στοχευμένων SPIONs σε μακροφάγα, έως την αναγνώριση ιχνών όγκου στην κυτταρική επιφάνεια.

Όσο ο ρόλος των μαγνητικών σωματιδίων στην ιατρική γίνεται σημαντικότερος τόσο μεγαλώνει και η σημασία της μαθηματικής και υπολογιστικής μοντελοποίησης της συμπεριφοράς των σωματιδίων σε βιολογικά συστήματα. Στην πλειοψηφία των εφαρμογών τα σωματίδια είναι διασκορπισμένα στο αίμα και στόχος είναι η κατασκευή μοντέλων για τη μελέτη της μεταφοράς υπό την επίδραση εξωτερικών μαγνητικών πεδίων. Η εναπόθεση των σωματιδίων σε αυτή την περίπτωση οφείλεται στην ανομοιογένεια του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου και ο αντίστοιχος μηχανισμός εναπόθεσης καλείται μαγνητοφόριση. Το συγκεκριμένο πεδίο έχει ανθίσει την τελευταία δεκαετία και η πολυπλοκότητα τον μοντελοποιημένων συστημάτων αυξάνεται σταθερά.

Οι περισσότερες μελέτες επικεντρώνονται σε απλές γεωμετρίες και ασχολούνται με την επίδραση της προέλευσης του μαγνητικού πεδίου και των χαρακτηριστικών του στη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων. Για παράδειγμα, οι Furlani και συνεργάτες μελέτησαν αριθμητικά τη Lagrangian διατύπωση της μαγνητοφόρισης σωματιδίων σε μικροκανάλι κυκλικής διατομής με στρωτή ροή, το οποίο μαγνητιζόταν κάθετα στον άξονά του από κυλινδρικό μαγνήτη απείρου μήκους (Furlani and Ng 2006b; Furlani and Furlani 2007b). Το αναλυτικό μοντέλο που ανέπτυξαν βασίζεται σε Lagrangian περιγραφή και προβλέπει τη μεταφορά και εναπόθεση θεραπευτικών μαγνητικών νανοσωματιδίων στο ανθρώπινο μικροαγγειακό σύστημα. Τα νανοσωματίδια, συνδεδεμένα με φαρμακευτικά μόρια εισέρχονται στο κυκλοφορικό σύστημα και εναποτίθενται στην περιοχή ενδιαφέροντος με χρήση ενός τοπικού μαγνητικού πεδίου. Το μοντέλο λαμβάνει υπόψη τις κυρίαρχες μαγνητικές δυνάμεις, αλλά και δυνάμεις σχετικές με τη ροή του ρευστού. Οι δυνάμεις αυτές εξαρτώνται από τη θέση και τις ιδιότητες του μαγνήτη, το μέγεθος και τις μαγνητικές ιδιότητες των νανοσωματιδίων, τις διαστάσεις του μικροκαναλιού, τον αιματοκρίτη και την ταχύτητα της ροής του ρευστού.

Οι ίδιοι ερευνητές εξέτασαν, επίσης, ένα βιοδιαχωριστή αποτελούμενο από μια συστοιχία αγώγιμων στοιχείων ενσωματωμένων κάτω από ένα μικροκανάλι (Furlani 2006a; Furlani 2007a; Furlani et al. 2007c). Η συσκευή αυτή βρίσκει εφαρμογή στο διαχωρισμό ερυθρών-λευκών αιμοσφαιρίων. Τα αγώγιμα στοιχεία της συσκευής παράγουν ένα ανομοιόμορφο μαγνητικό πεδίο με αποτέλεσμα να ασκείται δύναμη στα μαγνητικά σωματίδια μέσα στο μικροκανάλι. Οι εξισώσεις κίνησης των σωματιδίων παράγονται και εδώ με χρήση των αναλυτικών εκφράσεων των μαγνητικών και υδροδυναμικών δυνάμεων και λύνονται προκειμένου να μελετηθεί η μεταφορά και εναπόθεση των σωματιδίων.

Επιπρόσθετα, οι Rotariu και συνεργάτες επικεντρώθηκαν στο μαγνητικό διαχωρισμό σωματιδίων, που μεταφέρουν μικροοργανισμούς και εξέτασαν τόσο πειραματικά όσο και αριθμητικά τη ροή τους σε κυλινδρικούς σωλήνες υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου προερχόμενου από ένα ή δύο σιδηρομαγνητικά καλώδια μέσα σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (Rezlescu et al.

1995; Murariu et al. 2001; Rotariu et al. 2005b). Ακόμα, εργάστηκαν στη στοχευμένη μεταφορά φαρμάκων μέσω του κυκλοφορικού σε όγκους και εξέτασαν την επίδραση διαφόρων μαγνητικών πεδίων (Rotariu and Strachan 2005a).

Οι περισσότερες από τις προαναφερθείσες μελέτες ήταν διδιάστατες. Οι Haverkort, Kenjeres και συνεργάτες χρησιμοποίησαν εμπορικούς και μη κώδικες με Lagrangian περιγραφή και πάλι, προκειμένου να μελετήσουν την τριδιάστατη ροή μαγνητικών σωματιδίων. Σκοπός ήταν η στοχευμένη σε μαγνητικά σωματίδια, σε μεταφορά φαρμάκων, προσδεδεμένων συγκεκριμένες θέσεις του ανθρώπινου σώματος μέσω εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου. Συγκεκριμένα, εξέτασαν τη μαγνητοφόριση σωματιδίων σε μόνιμες συνθήκες μέσα σε ευθύγραμμο σωλήνα και σωλήνα με γωνία 90° κυκλικής διατομής, όπου το μαγνητικό πεδίο προερχόταν είτε από ρευματοφόρο αγωγό απείρου μήκους ή από κυκλικό ρευματοφόρο αγωγό, καθώς και χρονικά μεταβαλλόμενες ροές σωματιδίων στην αριστερή στεφανιαία αρτηρία και τις καρωτίδες, όταν το μαγνητικό πεδίο δημιουργείται από υπεραγώγιμο κυλινδρικό μαγνήτη (Haverkort and Kenjeres 2009; Haverkort et al. 2009a; Haverkort et al. 2009c; Kenjeres and Cohen Stuart 2010; Cohen Stuart et al. 2011).

Τα τελευταία χρόνια, οι Chen και συνεργάτες (Chen et al. 2007a; Chen et al. 2007b; Chen et al. 2007c; Chen et al. 2007e; Chen et al. 2008a; Chen et al. 2008b; Chen et al. 2008c; Bockenfeld et al. 2010; Chen et al. 2011) ερεύνησαν πειραματικά και αριθμητικά (εμπορικό λογισμικό και Lagrangian περιγραφή) μια φορητή συσκευή μαγνητικού διαχωρισμού κατάλληλη για αποτοξίνωση του ανθρώπινου αίματος. Η τεχνολογία αυτή σχεδιάστηκε για μελλοντική αποτοξίνωση εκτάκτου ανάγκης μεγάλου αριθμού θυμάτων, τόσο εντός όσο και εκτός νοσοκομείου, όπως για παράδειγμα μετά από ραδιολογικές επιθέσεις. То προτεινόμενο σύστημα βασίζεται σε νανοτεχνολογία βιοσυμβατά και χρησιμοποιεί υπερ-παραμαγνητικά νανοσφαιρίδια, τα οποία διαθέτουν ειδικούς αντιτοξικούς υποδοχείς, και κυκλοφορούν ελεύθερα στο ανθρώπινο αίμα μετά από ενδοφλέβια ένεση. Η συσκευή αποτελείται από παράλληλους σωλήνες, στους οποίους ρέει το αίμα, και μακριά κυλινδρικά καλώδια με άξονες παράλληλους στους άξονες των σωλήνων. Ολόκληρη η συσκευή βρίσκεται υπό την επίδραση μόνιμου ομοιόμορφου εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, το οποίο παράγεται από δύο παράλληλους μόνιμους μαγνήτες, έτσι ώστε το πεδίο που δημιουργείται να είναι κάθετο στους σωλήνες και στη ροή. Με αυτόν τον τρόπο τα καλώδια παράγουν ένα ανομοιόμορφο μαγνητικό πεδίο επαγωγής μέσα στους σωλήνες. Αν υπάρχουν μαγνητικά σωματίδια στο ρευστό (αίμα), που εισέρχεται στη συσκευή, τότε αυτά επηρεάζονται από το μαγνητικό πεδίο. Μεταβάλλοντας τις ιδιότητες των καλωδίων και κατά συνέπεια και του μαγνητικού πεδίου επαγωγής, όπως επίσης και τη γεωμετρία του σωλήνα, ώστε να επιτευχθούν μεγάλες κλίσεις μαγνητικού πεδίου, τα σωματίδια δύναται να απομακρυνθούν εξολοκλήρου από το ρευστό. Στις εργασίες αυτές έγινε πρόβλεψη του κλάσματος εναπόθεσης των σωματιδίων για διαφορετικές διατάξεις σωλήνα-καλωδίων, συνθήκες ροής (μέση ταχύτητα ροής ρευστού) και για διαφορετικά ρευστά (π.χ. καθαρό καθώς νερό. διάλυμα αιθυλενογλυκόλης-νερού, ανθρώπινο αίμα) με τρισδιάστατο αριθμητικό

μοντέλο. Τα αποτελέσματα του μοντέλου αξιολογήθηκαν με βάση πειραματικές μετρήσεις που είχαν προηγηθεί.

Από τις παραπάνω μελέτες, γίνεται ξεκάθαρο ότι στη μεγάλη πλειοψηφία των αριθμητικών μελετών μαγνητοφόρισης χρησιμοποιείται Lagrangian περιγραφή. Αξιοσημείωτες εξαιρέσεις είναι οι δουλειές των Habibi and Ghasemi (2011); Khashan et al. (2011a); Khashan et al. (2011b), οι οποίοι μελέτησαν τη ροή μαγνητικών σωματιδίων υπό την επίδραση μαγνητικών πεδίων με χρήση Euler μεθοδολογίας.

Οι μελέτες των Khashan και συνεργατών (Khashan et al. 2011a; Khashan et al. 2011b) θεωρούν Νευτώνειο ρευστό και διπλή σύζευξη (η ροή του ρευστού επηρεάζεται από τα σωματίδια). Η εργασίες αυτές παρουσιάζουν αριθμητική προσομοίωση μαγνητικού διαχωρισμού επισημασμένων βιολογικών ειδών από ρέον ρευστό σε διδιάστατο κανάλι. Η μεταφορά των μαγνητικών βιολογικών ειδών μοντελοποιείται μέσω σύζευξης της ροής του ρευστού με μια εξίσωση μεταφοράς-συναγωγής των σωματιδίων σε Euler περιγραφή. Ένα μαγνητικό πεδίο επιβάλλεται μέσα στο διαχωριστή, το οποίο προκαλεί τη συσσώρευση των ειδών αυτών στην περιοχή με τη μεγαλύτερη ένταση πεδίου. Η συσσώρευση τους στην περιοχή αυτή επιτρέπει πλέον τη συλλογή τους από το ετερογενές δείγμα. Η αλληλεπίδραση μεταξύ των δυνάμεων μαγνητοφόρισης και αυτών λόγω κανονικής διάχυσης αναλύονται για ροές υψηλής και χαμηλής αδράνειας.

Από την άλλη, η μελέτη των Habibi and Ghasemi (2011) θεωρεί μη-Νευτώνειο ρευστό. Στόχος της συγκεκριμένης μελέτης είναι να ερευνήσει την επίδραση ενός μαγνητικού πεδίου στη συγκέντρωση όγκου μαγνητικών νανοσωματιδίων μέσα σε μη-Νευτώνειο βιορευστό (αίμα), ως μεταφορείς φαρμάκων. Και εδώ θεωρείται διπλή σύζευξη, αφού λαμβάνεται υπόψη η επίδραση των σωματιδίων στο πεδίο ροής. Οι κυρίαρχες μη-γραμμικές διαφορικές εξισώσεις συγκέντρωσης και οι Navier-Stokes συνδυάζονται με το μαγνητικό πεδίο και λύνονται με χρήση ενός κώδικα πεπερασμένων όγκων που αναπτύχθηκε. Τα σωματίδια συσσωρεύονται κοντά στη μαγνητική πηγή μέχρι που αρχίζουν να φαίνονται σαν στερεό αντικείμενο. Η συσσώρευση αυτή προκαλείται λόγω της μαγνητικής δύναμης, η οποία ξεπερνά την αντίσταση του ρευστού και αυξάνει με την αύξηση της μαγνητικής δύναμης και του μεγέθους των σωματιδίων. Επίσης, η μαγνητική ευαισθησία των νανοσωματιδίων επηρεάζει το πεδίο ροής και τη συγκέντρωση. Οι μελέτες αυτές, παρόλο που είναι προχωρημένες όσον αφορά τα εμπλεκόμενα φυσικά φαινόμενα, περιορίζονται σε διδιάστατες ροές.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούνται τεχνικές υπολογιστικής ρευστοδυναμικής, για τη προσομοίωση της ροής συστήματος υγρούσωματιδίων εντός αγωγών κυκλικής διατομής, με περιγραφή κατά Euler τόσο για το ρευστό όσο και για τα σωματίδια. Συγκεκριμένα, επιλύονται αριθμητικά οι εξισώσεις Navier-Stokes για την εύρεση του πεδίου ταχύτητας και πίεσης του ρευστού ενώ η συγκέντρωση των σωματιδίων προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων. Η μελέτη αυτή είναι παραμετρική ως προς τη γεωμετρία των αγωγών (διάμετρος, μήκος), τα χαρακτηριστικά της ροής του ρευστού (πυκνότητα, ιξώδες, μέση ταχύτητα ροής), τις ιδιότητες των σωματιδίων (μέγεθος, υλικό) και τα χαρακτηριστικά του μαγνητικού πεδίου. Για τους σκοπούς της εργασίας χρησιμοποιήθηκαν υπάρχοντες υπολογιστικοί κώδικες (Neofytou 2005; Neofytou and Tsangaris 2006; Pilou 2012), οι οποίοι προσαρμόστηκαν και εμπλουτίστηκαν όπου χρειάστηκε για τις ανάγκες της παρούσας εφαρμογής, αλλά και εμπορικά διαθέσιμα υπολογιστικά εργαλεία.

Η δομή της εργασίας είναι η ακόλουθη:

- Στο Κεφάλαιο 2 δίνεται το θεωρητικό υπόβαθρο γύρω από τις ροές ρευστού-σωματιδίων και παρουσιάζονται τα αριθμητικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται.
- Στο Κεφάλαιο 3 περιγράφεται το θεωρητικό υπόβαθρο σχετικά με την μαγνητική δύναμη που ασκείται στα σωματίδια με βάση τα διάφορα μοντέλα μαγνήτισης και παρέχονται οι αναλυτικές σχέσεις των μαγνητικών πεδίων που χρησιμοποιούνται στην εργασία.
- Στο Κεφάλαιο 4 η πλήρως Euler μεθοδολογία χρησιμοποιείται για τη μελέτη της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων που βρίσκονται διασκορπισμένα σε υγρό μέσο υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.
- Τέλος, στο Κεφάλαιο 5 συνοψίζονται τα συμπεράσματα που προέκυψαν από την παρούσα εργασία.

### 2 Θεωρία και περιγραφή μοντέλου

Στο παρόν κεφάλαιο δίνεται το θεωρητικό υπόβαθρο όσον αφορά τις ροές ρευστού-σωματιδίων και παρουσιάζονται τα αριθμητικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για την επίλυση των εξισώσεων.

### 2.1 Συνεχής φάση

#### 2.1.1 Εξισώσεις

Έστω S μια κλειστή επιφάνεια, η οποία σχηματίζει έναν κλειστό όγκο Ω τυχαίου σχήματος μέσα σε μια πεπερασμένη περιοχή ροής ρευστού. Ο όγκος αυτός είναι σταθερός στο χώρο και το ρευστό ρέει μέσα από αυτόν, όπως φαίνεται στο Σχ.2.1.



Σχήμα 2.1: Γενικός πεπερασμένος υπολογιστικός όγκος (Pilou 2012).

Η ολοκληρωματική μορφή της εξίσωσης συνέχειας ενός ασυμπίεστου ρευστού γράφεται ως:

$$\int_{S} \vec{\upsilon} \cdot d\vec{S} = 0 \ , \ (1)$$

και οι εξισώσεις ορμής (τριδιάστατο πεδίο):

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega} \rho_{f} u d\Omega + \int_{S} \rho_{f} u \vec{\upsilon} \cdot d\vec{S} = -\int_{S} \rho \hat{i} \cdot d\vec{S} + \int_{S} \mu_{f} \left[ 2 \frac{\partial u}{\partial x} \hat{i} + \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \hat{j} + \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{k} \right] d\vec{S}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_{f} v d\Omega + \int_{S} \rho_{f} v \vec{\upsilon} \cdot d\vec{S} = -\int_{S} \rho \hat{j} \cdot d\vec{S} + \int_{S} \mu_{f} \left[ \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \hat{i} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \hat{j} + \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \hat{k} \right] d\vec{S}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_{f} w d\Omega + \int_{S} \rho_{f} w \vec{\upsilon} \cdot d\vec{S} = -\int_{S} \rho \hat{k} \cdot d\vec{S} + \int_{S} \mu_{f} \left[ \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{i} + \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \hat{j} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \hat{k} \right] d\vec{S}$$

$$(2)$$

όπου  $\vec{\upsilon} = u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}$  είναι η ταχύτητα του ρευστού, ρ<sub>f</sub> η πυκνότητα του ρευστού, d $\vec{S} = \hat{n}dS$  η στοιχειώδης επιφάνεια, όπου  $\hat{n}$  το κάθετο σε αυτή

μοναδιαίο διάνυσμα, dΩ ο όγκος του στοιχείου ρευστού και ἶ, ĵ,k τα Καρτεσιανά διανύσματα βάσης.

Αυτές οι εξισώσεις αποτελούν τις εξισώσεις Navier-Stokes σε ολοκληρωματική μορφή για Νευτώνειο ασυμπίεστο ρευστό. Στην παρούσα εργασία, εξετάζονται μόνιμες ροές, οπότε ο πρώτος όρος του αριστερού μέλους στις Εξ.(2) μηδενίζεται, απλοποιώντας τις περαιτέρω.

Εάν u<sub>o</sub> και I είναι η χαρακτηριστική ταχύτητα και το χαρακτηριστικό μήκος της ροής αντίστοιχα ενός δοθέντος προβλήματος αντίστοιχα, οι Εξ.(2) γράφονται αδιάστατα (για λόγους απλότητας χρησιμοποιούνται τα ίδια σύμβολα):

$$\begin{split} &\int_{S} u\vec{\upsilon} \cdot d\vec{S} = -\int_{S} p\hat{i} \cdot d\vec{S} + \frac{1}{Re} \int_{S} \mu_{f} \left[ 2\frac{\partial u}{\partial x} \hat{i} + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) \hat{j} + \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) \hat{k} \right] d\vec{S} \\ &\int_{S} v\vec{\upsilon} \cdot d\vec{S} = -\int_{S} p\hat{j} \cdot d\vec{S} + \frac{1}{Re} \int_{S} \mu_{f} \left[ \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) \hat{i} + 2\frac{\partial v}{\partial y} \hat{j} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \hat{k} \right] d\vec{S} \quad , \quad (3) \\ &\int_{S} w\vec{\upsilon} \cdot d\vec{S} = -\int_{S} p\hat{k} \cdot d\vec{S} + \frac{1}{Re} \int_{S} \mu_{f} \left[ \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) \hat{i} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \hat{j} + 2\frac{\partial w}{\partial z} \hat{k} \right] d\vec{S} \end{split}$$

Χρησιμοποιώντας τα μεγέθη ρ<sub>f</sub>u<sup>2</sup> και u<sub>o</sub>/l για την αδιαστατοποίηση της πίεσης και των όρων διατμητικής τάσης, αντίστοιχα. Στις Εξ.(3), Re είναι ο αριθμός Reynolds της ροής, που ορίζεται ως:

$$Re = \frac{\rho_f u_o I}{\mu_f} , \quad (4)$$

ο οποίος και εκφράζει το λόγο των αδρανειακών δυνάμεων προς τις δυνάμεις συνεκτικότητας μέσα στο ρευστό. Στην Εξ.(4), μ<sub>f</sub> είναι η δυναμική συνεκτικότητα του ρευστού.

#### 2.1.2 Αριθμητική επίλυση

Οι εξισώσεις Navier-Stokes για το τριδιάστατο ασυμπίεστο πεδίο ροής λύνονται αριθμητικά με χρήση του μη-εμπορικού CFD κώδικα CADBA (Computational Algorithm for Diagnosis of Biofluid flow Abnormalities). Ο κώδικας βασίζεται στη μεθοδολογία του Ferziger and Peric 2002) και αναπτύχθηκε από τους Neofytou 2005), Neofytou and Tsangaris 2006). Ο κώδικας αυτός έχει αξιολογηθεί σε διάφορες συνθήκες ροής και παρακάτω παρατίθενται τα βασικά χαρακτηριστικά του.

Ο κώδικας ενσωματώνει μεθοδολογία πεπερασμένων όγκων σε multiblock, σωματόδετα 3-D πλέγματα, όπου λαμβάνεται υπόψη και η μηορθογωνιότητα του πλέγματος. Για να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα της πίεσης και να διασφαλιστεί ότι το πεδίο ταχυτήτων του ρευστού ικανοποιεί την εξίσωση συνέχειας, από την εξίσωση συνέχειας διατυπώνεται μια εξίσωση διόρθωσης πίεσης και χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με τη μέθοδο SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, Patankar 1980) στον κώδικα. Η SIMPLE είναι μια επαναληπτική μέθοδος για προβλήματα με σύζευξη ταχύτητας-πίεσης. Εκκινώντας με μια αρχική εκτίμηση του πεδίου ροής, οι Navier-Stokes λύνονται για το πεδίο ταχυτήτων, μετά διορθώνεται το πεδίο πιέσεων μέσω της εξίσωσης διόρθωσης πίεσης και ενημερώνονται οι ταχύτητες. Οι νέες τιμές των ταχυτήτων και της πίεσης ικανοποιούν τώρα την εξίσωση συνέχειας, αλλά όχι απαραίτητα τις εξισώσεις ορμής. Έτσι, η διαδικασία επαναλαμβάνεται με τις ενημερωμένες τιμές για το πεδίο, μέχρι η λύση να ικανοποιεί τόσο την εξίσωση συνέχειας όσο και τις εξισώσεις ορμής εντός της επιθυμητής ακρίβειας πάντα.

Οι Εξ.(3) διακριτοποιούνται στον CADBA με χρήση εμπρός σχήματος Euler για το χρονικά μεταβαλλόμενο όρο, το τρίτης τάξης σχήμα QUICK για τον όρο συναγωγής και το δεύτερης-τάξης σχήμα κεντρικών διαφορών (CDS) για τον όρο διάχυσης (όροι συνεκτικότητας), ενώ ο όρος πίεσης αντιμετωπίζεται ως πηγή (Ferziger and Peric 2002). Το γραμμικό σύστημα που προκύπτει λύνεται επαναληπτικά με τη μέθοδο SIP (Strongly Implicit Procedure), μία ημιτελής μέθοδο LU παραγοντοποίησης, η οποία προτάθηκε από τον Stone 1968).

Στην παρούσα μελέτη, η επίλυση γίνεται για ασυμπίεστο Νευτώνειο ρευστό, στρωτή ροή, σταθερές ιδιότητες ρευστού και μονή σύζευξη, δηλαδή η επίδραση της σωματιδιακής φάσης στο υδροδυναμικό πεδίο θεωρείται αμελητέα. Ακόμα, θεωρείται σταθερό προφίλ ταχύτητας και πίεσης στην είσοδο και εφαρμόζεται συνθήκη μη-ολίσθησης της ταχύτητας του ρευστού στα τοιχώματα, ενώ στην έξοδο τόσο η ταχύτητα όσο και η πίεση υπολογίζονται με βάση τις τιμές στους γειτονικούς κόμβους. Ως προφίλ ταχύτητας στην είσοδο λαμβάνεται το προφίλ πλήρους ανεπτυγμένης ροής σε ευθύ αγωγό κυκλικής διατομής, το οποίο για Νευτώνειες ροές μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά. Στη περίπτωση αυτή, το (παραβολικό) προφίλ ταχύτητας σε αδιάστατη μορφή δίνεται από τη παρακάτω εξίσωση:

$$\upsilon\Big|_{inlet} = 2\left[1 - \left(\frac{r}{r_t}\right)^2\right], \ 0 \le r \le r_t$$
, (5)

όπου  $r_t = d_t / 2$  η ακτίνα του αγωγού.

### 2.2 Σωματιδιακή φάση

#### 2.2.1 Γενική Δυναμική Εξίσωση

Η μεταβολή στο χώρο και στο χρόνο της κατανομής μεγέθους των σωματιδίων, λόγω των διαφόρων φυσικών διεργασιών, έχει μεγάλη σημασία στη μελέτη σωματιδιακών ροών. Υπάρχουν δύο κατηγορίες διεργασιών που μπορούν να μεταβάλλουν την κατανομή μεγέθους σε ένα σταθερό στοιχειώδη όγκο: α) εσωτερικές διεργασίες, όπως η συσσωμάτωση και η συνάθροιση και β) εξωτερικές διεργασίες, όπως η συναγωγή και η διάχυση, που οφείλονται σε κλίσεις συγκέντρωσης και θερμοκρασίας στο ρευστό, καθώς και οι εξωτερικές δυνάμεις (βαρύτητα, ηλεκτρομαγνητισμός κλπ). Η διαφορική-ολοκληρωματική εξίσωση, η οποία περιγράφει την επίδραση αυτών των φαινομένων στην κατανομή μεγέθους των σωματιδίων ονομάζεται Γενική Δυναμική Εξίσωση (General Dynamic Equation, GDE). Με δεδομένες τις κατάλληλες αρχικές και συνοριακές συνθήκες, η GDE περιγράφει πλήρως την κατανομή μεγέθους των σωματιδίων σε μια ροή σωματιδίων-ρευστού.

Με την παρουσία ροής ρευστού, η GDE δίνεται από το τύπο (Drossinos and Housiadas 2006):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \vec{nv_p} \right) = \frac{\partial n}{\partial t} \bigg|_{f-p} + \frac{\partial n}{\partial t} \bigg|_{c-a}, (6)$$

όπου n(v;r,t) ο αριθμός συγκέντρωσης σωματιδίων με όγκο μεταξύ v και v+dv και v<sub>p</sub> η μέση σωματιδιακή ταχύτητα.

Στην Εξ.(6), ο πρώτος όρος στο αριστερό μέλος αναφέρεται στη συσσώρευση σωματιδίων στο χρόνο και ο δεύτερος στη συναγωγή σωματιδίων λόγω εξωτερικών διεργασιών, ενώ το δεξί μέλος αντιπροσωπεύει τις εσωτερικές διεργασίες. Ο πρώτος όρος αντιστοιχεί στη μετατροπή από ρευστή σε σωματιδιακή φάση και ο δεύτερος στη συσσωμάτωση και τη συνάθροιση. Οι διάφορες εσωτερικές και εξωτερικές διεργασίες θα συζητηθούν παρακάτω.

#### Εσωτερικές διεργασίες

Η σχετική κίνηση των σωματιδίων μέσα σε ρευστό οδηγεί σε συγκρούσεις, οι οποίες μπορεί να οδηγήσουν στο σχηματισμό νέων σωματιδίων, είτε μέσω συνάθροισης, όπου η ταυτότητα και το σχήμα των αρχικών σωματιδίων διατηρείται, είτε μέσω συσσωμάτωσης, όπου τα αρχικά σωματίδια χάνουν τελείως τα χαρακτηριστικά τους. Υπάρχουν διάφορα φαινόμενα που οδηγούν σε σχετική κίνηση μεταξύ των σωματιδίων: α) Brownian διάχυση, β) στρωτή διάτμηση ή τύρβη στο ρευστό, γ) επίδραση πεδίου δυνάμεων εξωτερικού (π.χ. βαρυτικό, ηλεκτροστατικό). Н συσσωμάτωση (ή η συνάθροιση) μειώνει την αριθμητική συγκέντρωση των σωματιδίων, ενώ αυξάνει το μέγεθός τους. Πάντως, η συνολική σωματιδιακή μάζα διατηρείται σε αυτές τις διεργασίες σε αντίθεση με τις μετατροπές ρευστού-σωματιδίου.

Μιας και οι εσωτερικές διεργασίες δε θα ληφθούν υπόψη σε αυτή τη μελέτη, δε θα γίνει περαιτέρω ανάλυση των μηχανισμών αυτών. Λεπτομερής ανάλυση των διαφόρων εσωτερικών διεργασιών μπορεί να βρεθεί στις μελέτες των Seinfeld and Pandis (1998); Hinds (1999); Friedlander (2000); Drossinos and Housiadas (2006).

#### Εξωτερικές διεργασίες

Οι εξωτερικές διεργασίες είναι αυτές που αλλάζουν την κατανομή μεγέθους σωματιδίων με μεταφορά των σωματιδίων πέρα από τα όρια του στοιχειώδους όγκου. Διαφορετικά φαινόμενα επηρεάζουν την κίνηση των σωματιδίων, ανάλογα αν το ρευστό είναι ακίνητο ή ρέει. Οι μηχανισμοί κίνησης των σωματιδίων μπορούν να τα οδηγήσουν, είτε πέρα από τα όρια του στοιχειώδους όγκου, είτε να τα εναποθέσουν σε κάποια επιφάνεια. Έτσι, αυτοί οι μηχανισμοί αναφέρονται συχνά ως μηχανισμοί εναπόθεσης. Στη συνέχεια θα περιγραφούν αρκετοί μηχανισμοί εναπόθεσης και θα φανεί πως ενσωματώνονται στη GDE.

#### 2.2.2 Μηχανισμοί Εναπόθεσης

Θεωρούμε ένα σφαιρικό σωματίδιο διαμέτρου d<sub>p</sub>, το οποίο κινείται εντός συνεκτικού ρευστού. Η δύναμη που απαιτείται για να μετακινηθεί το σωματίδιο μέσα στο ρευστό λέγεται αντίσταση,  $\vec{F}_{\rm D}$ , η κατεύθυνση της οποίας είναι αυτή της σχετικής ταχύτητας ρευστού-σωματιδίου,  $\vec{\upsilon} - \vec{v}_{\rm P}$ , και το μέτρο της δίνεται από τη γενική μορφή της εξίσωσης αντίστασης του Νεύτωνα (Hinds 1999):

$$F_{\text{D}} = C_{\text{D}} \frac{\pi}{8} \rho_{\text{f}} d_{\text{p}}^2 \left| \vec{\upsilon} - \vec{v}_{\text{p}} \right|^2. \ \ \text{(7)}$$

Στην παραπάνω εξίσωση ο C<sub>D</sub> είναι μια αδιάστατη ποσότητα γνωστή ως συντελεστής αντίστασης και είναι μια συνάρτηση του αριθμού Re του σωματιδίου:

$$\mathsf{Re}_{\mathsf{p}} = \frac{\rho_{\mathsf{f}} \mathsf{d}_{\mathsf{p}} \left| \vec{\upsilon} - \vec{\mathsf{v}}_{\mathsf{p}} \right|}{\mu_{\mathsf{f}}} \quad (8)$$

Σε περιπτώσεις όπου η αδρανειακές δυνάμεις είναι αμελητέες σε σχέση με τις δυνάμεις συνεκτικότητας, ο Stokes έδειξε ότι η αντίσταση που ασκείται σε ένα σωματίδιο από το ρευστό ισούται με:

$$\mathbf{F}_{\mathrm{D}} = 3\pi\mu_{\mathrm{f}}\mathbf{d}_{\mathrm{p}}\left|\vec{\upsilon} - \vec{\mathbf{v}}_{\mathrm{p}}\right| \ . \ \textbf{(9)}$$

Συνεπώς, ο συντελεστής αντίστασης δίνεται από το τύπο:

$$C_{D} = \frac{24}{Re_{p}}$$
, (10)

δηλαδή, είναι αντιστρόφως ανάλογος του αριθμού Re<sub>p</sub> του σωματιδίου. Η Eξ.(9) είναι γνωστή ως νόμος του Stokes. Αμελητέες αδρανειακές δυνάμεις σε σύγκριση με δυνάμεις συνεκτικότητας προϋποθέτουν χαμηλούς Re σωματιδίου και στρωτή ροή. Η Εξ.(9) βασίζεται σε πολλές ακόμα υποθέσεις εκτός του χαμηλού Re: α) ασυμπίεστο ρευστό, β) δεν υπάρχουν τοιχώματα ή άλλα σωματίδια κοντά, γ) το σωματίδιο είναι άκαμπτο δ) εφαρμόζεται συνθήκη μη-ολίσθησης του ρευστού στην επιφάνεια του σωματιδίου.

#### Διάχυση

Τα σωματίδια βρίσκονται σε συνεχείς συγκρούσεις με τα μόρια του ρευστού. Αποτέλεσμα των συγκρούσεων αυτών είναι η τυχαία κίνηση των σωματιδίων που ονομάζεται Brownian κίνηση. Μακροσκοπικά αυτή η κίνηση σημαίνει ροή σωματιδίων από περιοχές υψηλής συγκέντρωσης σε περιοχές χαμηλής, η οποία είναι γνωστή ως διάχυση και περιγράφεται από το νόμο του Fick.

Σύμφωνα με αυτόν, αν J<sub>p</sub> είναι η ροή και D ο συντελεστής διάχυσης των σωματιδίων, τότε:

$$\vec{J}_p = -D\nabla n$$
 . (11)

Ο συντελεστής διάχυσης δίνεται από την εξίσωση Stokes-Einstein:

$$D = \frac{k_{\rm B}T_{\rm f}}{3\pi\mu_{\rm f}d_{\rm p}} \ , \ (12)$$

όπου  $k_B = 1.381 \times 10^{-23} J/K$  η σταθερά Boltzmann και  $T_f$  η θερμοκρασία του ρευστού. Ο συντελεστής διάχυσης εξαρτάται τόσο από τις ιδιότητες του ρευστού όσο και από το μέγεθος του σωματιδίου. Από την Εξ.(12) φαίνεται ότι η διάχυση γίνεται σημαντικότερη καθώς το μέγεθος του σωματιδίου μειώνεται.

#### Βαρυτική καθίζηση

Η ταχύτητα που αποκτά ένα σωματίδιο λόγω της επίδρασης της βαρύτητας ισούται με (Drossinos and Housiadas 2006):

$$\vec{v}_{s} = \frac{\rho_{p}d_{p}^{2}}{18\mu_{f}} \left(1 - \frac{\rho_{f}}{\rho_{p}}\right) \vec{g} , \quad (13)$$

με g την επιτάχυνση της βαρύτητας, και ο αντίστοιχος μηχανισμός εναπόθεσης ονομάζεται βαρυτική καθίζηση.

Η ταχύτητα καθίζησης του σωματιδίου αυξάνει σημαντικά με την αύξηση του μεγέθους του, καθώς είναι ανάλογη του τετραγώνου της διαμέτρου.

#### Αδρανειακή πρόσκρουση

Η αδράνεια είναι ένας πολύ κρίσιμος μηχανισμός εναπόθεσης, ο οποίος εμφανίζεται σε πολλές βιομηχανικές (ταξινομητές μεγέθους, φίλτρα) και βιολογικές (εναπόθεση στο αναπνευστικό) διεργασίες. Τα σωματίδια δεν ακολουθούν ακριβώς τις γραμμές ροής του ρευστού λόγω την αδράνειας τους. Έτσι, μπορεί να χτυπήσουν και να εναποτεθούν στις γειτονικές επιφάνειες.

Μία παράμετρος, η οποία χαρακτηρίζει την αντίδραση του σωματιδίου στις αλλαγές ροής του ρευστού, είναι ο χρόνος χαλάρωσης σωματιδίου, τ<sub>p</sub>, που ορίζεται ως ο χρόνος που χρειάζεται ένα σωματίδιο διαμέτρου d<sub>p</sub> και πυκνότητας ρ<sub>p</sub> για να πιάσει την τελική του ταχύτητα, αν αφεθεί σε ένα ρευστό ιξώδους μ<sub>f</sub>. Αυτές οι ποσότητες σχετίζονται μέσω του τύπου (Drossinos and Housiadas 2006):

$$\tau_{p} = \frac{\rho_{p}d_{p}^{2}}{18\mu_{f}} \ , \ (14)$$

δηλαδή ο χρόνος χαλάρωσης είναι μια συνάρτηση των ιδιοτήτων του ρευστού (ιξώδες) και του σωματιδίου (πυκνότητα, διάμετρος). Αντικατάσταση στην Εξ.(13), δείχνει ότι  $\vec{v}_s = \tau_p \vec{g}$ . Κατά αναλογία, η ταχύτητα  $\vec{v}_p$  που αποκτά ένα σωματίδιο στο οποίο ασκείται μια δύναμη  $\vec{F}$  δίνεται από τη σχέση:

$$\vec{v}_p = \tau_p \frac{\vec{F}}{m_p} \ , \ (15)$$

όπου m<sub>p</sub> η μάζα του σωματιδίου.

Ένας πολύ χρήσιμος αδιάστατος αριθμός όσον αφορά τη μελέτη της επίδρασης της αδράνειας των σωματιδίων είναι ο αριθμός Stokes, ο οποίος ορίζεται ως ο λόγος του χρόνου χαλάρωσης προς τον χαρακτηριστικό χρόνο της ροής:

$$St = \frac{\tau_p}{I/u_o} = \frac{\rho_p d_p^2 u_o}{18\mu_f I}$$
. (16)

Ο αριθμός Stokes χρησιμοποιείται ευρέως ως κριτήριο της ευκολίας, με την οποία ένα σωματίδιο προσαρμόζεται στη ροή του ρευστού. St<1σημαίνει ότι το σωματίδιο ακολουθεί από κοντά στις γραμμές ροής του ρευστού και επομένως, η πρόσκρουση δεν είναι σημαντικός μηχανισμός εναπόθεσης για τα συγκεκριμένα σωματίδια, αντίθετα, μεγάλοι αριθμοί Stokes (St>1) δείχνουν ότι τα σωματίδια αποκλίνουν από τις γραμμές ροής και προσκρούουν σε γειτονικές επιφάνειες.

Από τις Εξ.(14) και (16) γίνεται ξεκάθαρο ότι όσο μεγαλύτερο είναι ένα σωματίδιο τόσο σημαντικότερη είναι η επίδραση της αδράνειας ενώ αύξηση του ιξώδους του ρευστού οδηγεί σε μείωση του χρόνου χαλάρωσης

(ισοδύναμα του αριθμού Stokes). Επομένως, η σημασία της αδρανειακής πρόσκρουσης ως μηχανισμός εναπόθεσης εξαρτάται πάντα από το συνδυασμό του συστήματος ρευστού-σωματιδίων.

#### 2.2.3 Μεταφορά και Εναπόθεση των Σωματιδίων

Θεωρούμε έναν πληθυσμό όμοιων σφαιρικών σωματιδίων διαμέτρου d<sub>p</sub> και μάζας m<sub>p</sub>, τα οποία είναι διασκορπισμένα σε ρέον ασυμπίεστο ρευστό. Αν αγνοηθούν οι εσωτερικές διεργασίες αποδεικνύεται ότι η εξίσωση μεταφοράς σωματιδίων ολοκληρωματική και αδιάστατη μπορεί να γραφτεί:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \left( n \vec{v}_{\text{p}} \right) = 0 \ , \ (17)$$

ή για τη συγκέντρωση:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \left( c \vec{v}_{\text{p}} \right) = 0 \text{ , (18)}$$

όπου c( $\vec{r}$ ,t) = m<sub>p</sub>n( $\vec{r}$ ,t) η συγκέντρωση μάζας σωματιδίων.

Προκειμένου να δακριθεί η εξίσωση αυτή, η οποία αγνοεί τις εσωτερικές διεργασίες, από την GDE, θα αναφέρεται ως εξίσωση μεταφοράς πληθυσμού σωματιδίων (Population Transport Equation-PTE).

Η εξίσωση διατήρησης μάζας σωματιδιακής-φάσης (Εξ.(18)) για μόνιμες συνθήκες παίρνει τη μορφή μιας τροποποιημένης εξίσωσης συναγωγής-διάχυσης:

$$\nabla \cdot \left\lceil c \left( \vec{v}_{c} - D \ln c \right) \right\rceil = 0 , (19)$$

ή ισοδύναμα:

$$\nabla \cdot (\mathbf{c} \vec{v}_{c}) = \nabla (\mathbf{D} \nabla \mathbf{c}) ,$$
 (20)

επειδή c∇ ln c = ∇c.

Η ταχύτητα του σωματιδίου αποδεικνύεται ότι μπορεί να σπάσει σε δυο μέρη (Pilou 2012): το κομμάτι λόγω διάχυσης, το οποίο εξαρτάται μόνο από τη κλίση συγκέντρωσης σωματιδίων, και το κομμάτι λόγω συναγωγής  $\vec{v}_c$ , το οποίο εξαρτάται από τη συγκέντρωση των σωματιδίων. Συγκεκριμένα, η ταχύτητα συναγωγής σωματιδίου

$$\vec{v}_{c} = \vec{\upsilon} + \vec{v}_{ext} - \tau_{p}\vec{\upsilon}\cdot\nabla\vec{\upsilon}$$
, (21)

εξαρτάται μόνο από τη ταχύτητα του ρευστού και τις χωρικές της κλίσεις και περιέχει τις επιδράσεις της αδράνειας του σωματιδίου και των εξωτερικών πεδίων δυνάμεων.

Και αντικαθιστώντας την ταχύτητα στην Εξ.(20):

$$\nabla \cdot \left[ c \left( \vec{\upsilon} + \vec{v}_{ext} - \tau_{p} \vec{\upsilon} \cdot \nabla \vec{\upsilon} \right) \right] = \nabla \left( D \nabla c \right) .$$
 (22)

Σε ολοκληρωματική μορφή η Εξ.(20) γράφεται:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (c \vec{v}_{c}) d\Omega = \int_{\Omega} \nabla (D \nabla c) d\Omega \quad , \quad (23)$$

η οποία απλοποιείται με χρήση του θεωρήματος Gauss:

$$\int_{S} c \vec{v}_{c} \cdot d\vec{S} = D \int_{S} \nabla c \cdot d\vec{S} , \quad (24)$$

ή ισοδύναμα:

$$\int_{S} c \left( \vec{\upsilon} + \vec{v}_{ext} - \tau_{p} \vec{\upsilon} \cdot \nabla \vec{\upsilon} \right) \cdot d\vec{S} = D \int_{S} \nabla c \cdot d\vec{S} , \quad (25)$$

όπου θεωρούνται, επιπλέον, σταθερές ιδιότητες ρευστού-σωματιδίων, και επομένως, σταθερός συντελεστής διάχυσης.

Η παρούσα εργασία επικεντρώνεται σε ροή ρευστού-σωματιδίων σε αγωγούς (εσωτερικές ροές). Η διάμετρος του αγωγού d<sub>t</sub>, η μέση ταχύτητα του ρευστού στην είσοδο του αγωγού υ<sub>o</sub>, και η μέση συγκέντρωση μάζας σωματιδίων στην είσοδο c<sub>o</sub> χρησιμοποιούνται για την αδιαστατοποίηση της Εξ.(24), σύμφωνα με τις παρακάτω σχέσεις:

$$c = c_{o}c'$$

$$\vec{r} = d_{t}\vec{r}', \vec{S} = d_{t}^{2}\vec{S}', \nabla = \frac{1}{d_{t}}\nabla'$$

$$\vec{\upsilon} = \upsilon_{o}\vec{\upsilon}', \vec{v}_{ext} = \upsilon_{o}\vec{v}'_{ext} \quad . \quad (26)$$

$$\vec{\upsilon} \cdot \nabla \vec{\upsilon} = \frac{\upsilon_{o}^{2}}{d_{t}}\vec{\upsilon}' \cdot \nabla' \vec{\upsilon}'$$

Με αντικατάσταση των παραπάνω εξισώσεων στην Εξ.(25) έχουμε:

$$\int_{S} \mathbf{c}' \left[ \vec{\upsilon}' + \vec{v}'_{ext} - \frac{\tau_{p}}{d_{t} / u_{o}} \vec{\upsilon}' \cdot \nabla \vec{\upsilon}' \right] \cdot \mathbf{d}\vec{S}' = \frac{D}{d_{t} u_{o}} \int_{S} \nabla' \mathbf{c}' \cdot \mathbf{d}\vec{S}' \quad (27)$$

Ωστόσο, ο συντελεστής του όρου αδράνειας ισούται με τον αριθμό Stokes (Εξ.(16)), ορισμένος χρησιμοποιώντας το χαρακτηριστικό μήκος την ταχύτητα:

$$St = \frac{\tau_p U_o}{d_t} , \quad (28)$$

ενώ ο συντελεστής του όρου διάχυσης είναι ο αντίστροφος του αδιάστατου αριθμού Peclet, ο οποίος ορίζεται ως:

$$Pe = \frac{d_t u_o}{D} , \quad (29)$$

και αποτελεί την αναλογία της ροής συναγωγής προς τη ροή διάχυσης των σωματιδίων. Όσο ο Pe μεγαλώνει η ροή συναγωγής γίνεται σημαντικότερη από τη ροή διάχυσης και αντίστροφα. Να σημειωθεί ότι μεγάλος αριθμός Peclet σημαίνει χαμηλό συντελεστή διάχυσης και, επομένως, μεγαλύτερα σωματίδια για την ίδια γεωμετρία και συνθήκες ροής.

Τέλος, η εξίσωση μεταφοράς σωματιδίων σε ολοκληρωματική και αδιάστατη μορφή γράφεται:

$$\int_{S} c \left[ \vec{\upsilon}' + \vec{v}'_{ext} - \frac{\tau_{p}}{d_{t}/u_{o}} \vec{\upsilon}' \cdot \nabla \vec{\upsilon}' \right] \cdot d\vec{S} = P e^{-1} \int_{S} \nabla c \ d\vec{S} , \quad (30)$$

ή εκφρασμένη ως προς την ταχύτητα συναγωγής:

$$\int_{S} c \vec{v}_{c} \cdot d \vec{S} = P e^{-1} \int_{S} \nabla c \cdot d \vec{S} \quad . \quad (31)$$

#### 2.2.4 Οριακές Συνθήκες

Στην είσοδο χρησιμοποιείται ομοιόμορφη κατανομή συγκέντρωσης σωματιδίων (μοναδιαία συγκέντρωση στην είσοδο σε αδιάστατη μορφή):

$$c|_{i} = 1$$
. (32)

Η οριακή συνθήκη συγκέντρωσης σωματιδίων στα τοιχώματα είναι η συνήθης συνθήκη του πλήρως απορροφητικού τοιχώματος:

$$c|_{w} = 0$$
 , (33)

η οποία στο τοίχωμα δίνει μια ροή διάχυσης, J<sup>d</sup> , ίση με:

$$\left.J^{d}\right|_{w}=-Pe^{-1}\underset{S}{\int}\nabla c\cdot d\vec{S}\Big|_{w}\ .\ (34)$$

Επιπρόσθετα, υπάρχει μια πεπερασμένη μη-μηδενική ταχύτητα συναγωγής ακριβώς πριν από τον τοίχο, λόγω των εξωτερικών δυνάμεων (Εξ.(30)), που προκαλεί μια (αδιάστατη) ροή συναγωγής, J<sup>c</sup> |<sub>w</sub>, η οποία γράφεται:

$$J^{c}\Big|_{w} = \begin{cases} 0 \quad \text{if} \quad \vec{v}_{c} \cdot d\vec{S}\Big|_{w} \leq 0 \\ \int_{S} c\vec{v}_{c} \cdot d\vec{S}\Big|_{w} \quad \text{if} \quad \vec{v}_{c} \cdot d\vec{S}\Big|_{w} > 0 \end{cases}, \quad (35)$$

όπου η ταχύτητα συναγωγής του σωματιδίου, ν<sub>c</sub>, υπολογίζεται ακριβώς πριν το τοίχωμα, δηλαδή στον πιο κοντινό στο τοίχωμα κόμβο του πλέγματος. Συνεπώς, εάν η ροή συναγωγής στο σημείο αυτό είναι προς το τοίχωμα, τότε η ροή αυτή θα λαμβάνεται ως η ροή εναπόθεσης των σωματιδίων λόγω συναγωγής. Στην αντίθετη περίπτωση, θα είναι μηδενική. Η Εξ.(35) υποδεικνύει ότι η ροή συναγωγής λαμβάνεται υπόψη μόνο όταν τα σωματίδια εξέρχονται από το τοίχωμα. Είσοδος σωματιδίων έξω από το τοίχωμα δεν επιτρέπεται, καθώς είναι φυσικά μη-ρεαλιστικό για τα προβλήματα που εξετάζονται στην παρούσα εργασία. Τελικά, η συνολική (αδιάστατη) ροή εναπόθεσης γίνεται:

$$J_{dep} = J^{c} \Big|_{w} + J^{d} \Big|_{w} . \quad (36)$$

#### 2.2.5 Αριθμητική Επίλυση

Μόλις υπολογιστεί η ταχύτητα του ρευστού υ με χρήση του κώδικα CADBA, υπολογίζεται η ταχύτητα συναγωγής των σωματιδίων ν<sub>c</sub> και στη συνέχεια λύνεται η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων για τη συγκέντρωση. Η μεθοδολογία που χρησιμοποιείται για την επίλυση της ροής των σωματιδίων είναι ανάλογη με αυτή του ρευστού. Έτσι, η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων (Εξ.(30)) λύνεται στις τρεις διαστάσεις με χρήση μεθοδολογίας πεπερασμένων όγκων και ομόθετη διάταξη μεταβλητών, η οποία λαμβάνει υπόψη τη μη-ορθογωνιότητα πλέγματος και είναι κατάλληλη για multi-block πλέγματα.

Ο όρος της ταχύτητας συναγωγής αντιμετωπίζεται με μια προσέγγιση αναβαλλόμενης-διόρθωσης (deferred-correction) για να αποφευχθούν υψηλής-τάξης σχήματα, τα οποία θα οδηγούσαν σε μεγάλα υπολογιστικά μόρια (Ferziger and Peric 2002). Έτσι ο όρος συναγωγής χωρίζεται σε ένα πεπλεγμένο (implicit) όρο, ο οποίος διακριτοποιείται με χρήση ενός πρώτης τάξης ανάντι σχήματος (upwind discretization scheme-UDS) και ένα ρητό όρο (explicit), ο οποίος αποτελεί τη διαφορά του UDS από το δεύτερης τάξης κεντρικής διαφοράς σχήμα (central difference scheme-CDS). Όταν οι επαναλήψεις συγκλίνουν, το σχήμα χαμηλής-τάξης (UDS) ακυρώνεται και η λύση αντιστοιχεί στο σχήμα υψηλότερης τάξης (CDS). Το δεύτερης τάξης σχήμα διακριτοποίησης κεντρικών διαφορών χρησιμοποιείται και για τη διακριτοποίηση του όρου διάχυσης. Τέλος, το γραμμικό σύστημα που προκύπτει από τη διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων

επιλύεται αριθμητικά με την επαναληπτική μέθοδο SIP (Strongly Implicit Procedure), η οποία χρησιμοποιείται και για την επίλυση του πεδίου ροής.

Για περισσότερες λεπτομέρειες ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης παραπέμπεται στα Pilou et al. (2011); Pilou (2012).

### **3 Στοιχεία μαγνητισμού**

### 4.2 Μαγνητική δύναμη σε σωματίδια

Η μαγνητική δύναμη που ασκείται σε ένα μικρό σωματίδιο μπορεί να θεωρηθεί ίση με τη δύναμη που ασκείται σε ένα σημειακό μαγνητικό δίπολο ροπής m (Hallmark et al. 2010), και δίνεται από το τύπο:

$$\vec{F}_{m} = \left( \overrightarrow{m} \cdot \nabla \right) \vec{B}$$
 , (37)

ο οποίος δείχνει ότι η μαγνητική δύναμη  $\vec{F}_m$  προκύπτει από τη διαφόριση της μαγνητικής επαγωγής  $\vec{B}$  στην κατεύθυνση της μαγνητικής ροπής  $\vec{m}$ . Η Εξ.(37) υποδεικνύει ότι απαιτείται ένα ανομοιόμορφο πεδίο μαγνητικής επαγωγής προκειμένου η μαγνητική δύναμη σε ένα σωματίδιο να είναι μη μηδενική.

Αν υποθέσουμε ότι το σωματίδιο μαγνητίζεται ομοιόμορφα σε όλο τον όγκο του V<sub>p</sub> κι ότι το διερχόμενο ρευστό είναι ένα ισοτροπικό και ελαφρά διαμαγνητικό υλικό, όπως νερό ή αέρας, για τα οποία ισχύει  $\mu_f \approx \mu_o$ , όπου  $\mu_f$ η διαπερατότητα του ρευστού και  $\mu_o$  αυτή στο κενό, η Εξ.(37) γίνεται:

$$\vec{F}_{m} = \frac{V_{p}\chi}{\mu_{o}} \left( \vec{B} \cdot \nabla \right) \vec{B} \quad . \quad (38)$$

όπου χ η μαγνητική επιδεκτικότητα.

Εάν το μαγνητικό πεδίο είναι στατικό και δεν υπάρχουν ρεύματα στο ρευστό, τότε η εξίσωση Maxwell δίνει  $\nabla \times \vec{B} = 0$ . Λαμβάνοντας υπόψη, λοιπόν, αυτό το αποτέλεσμα και τη μαθηματική ταυτότητα:

$$\nabla(\vec{\mathbf{B}}\cdot\vec{\mathbf{B}}) = 2\left[\vec{\mathbf{B}}\times\left(\nabla\times\vec{\mathbf{B}}\right) + \left(\vec{\mathbf{B}}\cdot\nabla\right)\vec{\mathbf{B}}\right], (39)$$

συνεπάγεται ότι  $(\vec{B} \cdot \nabla)\vec{B} = \frac{1}{2}\vec{B} \cdot \vec{B} = \frac{1}{2}B^2$ , όπου  $B = |\vec{B}|$ . Επομένως, η Εξ.(38) γίνεται:

$$\vec{F}_{m} = V_{p} \chi \nabla \left( \frac{B^{2}}{2\mu_{o}} \right)$$
, (40)

ή χρησιμοποιώντας τη σχέση μαγνητικής επαγωγής και μαγνητικού πεδίου,  $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ :

$$\vec{F}_{m} = V_{p} \chi \nabla \left( \frac{\mu_{o} H^{2}}{2} \right) , (41)$$

Η μαγνητική επιδεκτικότητα  $\chi$  στις παραπάνω εξισώσεις μπορεί να είναι και η ίδια συνάρτηση του μαγνητικού πεδίου, δηλαδή  $\chi = f(\vec{H})$ . Ως εκ τούτου η

 $\vec{F}_m$  είναι γενικά μία πολύπλοκη χωρική συνάρτηση των διαφόρων εμπλεκόμενων ποσοτήτων (Zborowski et al. 1999). Για να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα αυτό μπορούν να γίνουν κάποιες απλοποιήσεις ανάλογα την εφαρμογή.

#### 3.6 Γραμμικό μοντέλο μαγνήτισης

Οι Furlani and Ng 2006b; Furlani 2007a) προσδιόρισαν την έκφραση της μαγνητικής δύναμης  $\vec{F}_m$  σε ένα σωματίδιο χρησιμοποιώντας ένα γραμμικό μοντέλο μαγνήτισης με κορεσμό και τη μέθοδο 'ενεργής' ροπής διπόλου του Jones 1995), θεωρώντας αραιή διασπορά σωματιδίων, δηλαδή αμελητέες επιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων και αλληλεπιδράσεις σωματιδίου-ρευστού (one-way coupling). Τα αποτελέσματά τους συνοψίζονται παρακάτω.

Σύμφωνα με τη μέθοδο 'ενεργής' ροπής διπόλου, το σωματίδιο που μαγνητίζεται μπορεί να αντικατασταθεί από ένα σημειακό δίπολο με μαγνητική ροπή  $\vec{m}_{p.eff}$ . Επομένως η δύναμη στο σωματίδιο ισούται με:

$$\vec{F}_{\text{m}}=\mu_{\text{f}}\left(\overrightarrow{m}_{\text{p,eff}}\cdot\nabla\right)\vec{H}$$
 , (42)

όπου Η το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Το 'ενεργό' σημειακό δίπολο θα πρέπει να είναι τέτοιο ώστε όταν τοποθετηθεί στο κέντρο του σωματιδίου, να προκαλεί την ίδια κατανομή μαγνητικού πεδίου γύρω από το σωματίδιο όπως θα έκανε το σωματίδιο στην πραγματικότητα.

Θεωρώντας ομοιόμορφη μαγνήτιση σε όλο τον όγκο του σωματιδίου,  $\vec{m}_{p,eff} = V_p \vec{M}_p$ , όπου  $\vec{M}_p$  η μαγνήτιση του, και ένα ελαφρά διαμαγνητικό ρευστό,  $\mu_f \approx \mu_o$ , η Εξ.(42) γίνεται:

$$\vec{F}_{m} = \mu_{o} V_{p} \left( \vec{M}_{p} \cdot \nabla \right) \vec{H} , \quad (43)$$

Στην Εξ.(43) χρειάζεται μία έκφραση για τη μαγνήτιση του σωματιδίου προκειμένου να υπολογιστεί η μαγνητική δύναμη. Στην περίπτωση αυτή εφαρμόζεται το γραμμικό μοντέλο μαγνήτισης. Για μη κορεσμένο σωματίδιο η μαγνήτιση ισούται με:

$$\vec{M}_{\text{p}}=\chi_{\text{p}}\vec{H}_{\text{in}}$$
 , (44)

όπου  $\chi_p = \mu_p / (\mu_o - 1)$  και  $\vec{H}_{in}$  το πεδίο εντός του σωματιδίου. Το τελευταίο είναι διαφορετικό από το εφαρμοζόμενο εξωτερικό πεδίο  $\vec{H}$  εξαιτίας του πεδίου απομαγνήτισης,  $\vec{H}_{dm}$ , το οποίο προκαλείται από το ίδιο το σωματίδιο. Ισχύει ότι  $\vec{H}_{in} = \vec{H} - \vec{H}_{dm}$ , ενώ για σφαίρα στο κενό με ομοιόμορφη μαγνήτιση το πεδίο απομαγνήτισης ισούται με  $\vec{H}_{dm} = \vec{M}_p / 3$ .

Από την άλλη μεριά, σε περίπτωση κορεσμού, δηλαδή αν  $|H_{in}| \ge |M_{p,sat} / \chi_p|$ , η μαγνήτιση του σωματιδίου είναι σταθερή και ίση με τη μαγνήτιση κορεσμού του:

$$\vec{M}_{p} = \vec{M}_{p,sat}$$
 , (45)

Γενικά, οι Furlani and Ng (2006b) έδειξαν ότι όταν δεν υπάρχει κορεσμός η μαγνήτιση του σωματιδίου δίνεται από το τύπο:

$$\vec{M}_{p} = \frac{3\chi_{p}(\chi_{p} - \chi_{f})}{(\chi_{p} - \chi_{f}) + 3(\chi_{f} + 1)}\vec{H} , \quad (46)$$

και το μαγνητικό πεδίο εντός του σωματιδίου ισούται:

$$\vec{H}_{in} = \frac{3(\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3(\chi_f + 1)} \vec{H} , \quad (47)$$

Η 'ενεργή' μαγνητική ροπή γράφεται:

$$\vec{m}_{p,eff} = V_p f(H) \vec{H}$$
, (48)

όπου η συνάρτηση f(H) ισούται:

$$f(H) = \begin{cases} \frac{3(\chi_{p} - \chi_{f})}{(\chi_{p} - \chi_{f}) + 3(\chi_{f} + 1)} & , H < \frac{3(\chi_{p} - \chi_{f})}{(\chi_{p} - \chi_{f}) + 3(\chi_{f} + 1)}\chi_{p} - \chi_{f}M_{p,sat} \\ \frac{M_{p,sat}}{H} & H \ge \frac{3(\chi_{p} - \chi_{f})}{(\chi_{p} - \chi_{f}) + 3(\chi_{f} + 1)}\chi_{p} - \chi_{f}M_{p,sat} \end{cases}$$
(49)

Η πρώτη περίπτωση αντιστοιχεί σε μη κορεσμένο σωματίδιο, ενώ η δεύτερη σε κορεσμένο. Η Εξ.(49) απλοποιείται όταν |χ<sub>p</sub>|<<1 :

$$f(H) = \begin{cases} \frac{3(\chi_{p} - \chi_{f})}{(\chi_{p} - \chi_{f}) + 3} & , H < \frac{3(\chi_{p} - \chi_{f})}{(\chi_{p} - \chi_{f}) + 3}\chi_{p} - \chi_{f}M_{p,sat} \\ \frac{M_{p,sat}}{H} & H \ge \frac{3(\chi_{p} - \chi_{f})}{(\chi_{p} - \chi_{f}) + 3}\chi_{p} - \chi_{f}M_{p,sat} \end{cases}, (50)$$

ή όταν |χ<sub>p</sub>|>>1 :

$$f\left(H\right) = \begin{cases} 3 & , H < M_{p,sat} / 3 \\ \frac{M_{p,sat}}{H} & , H \ge M_{p,sat} / 3 \end{cases} \quad , \ (51)$$

Τέλος, όταν  $|\chi_p - \chi_f| << 1$ , για τη μη κορεσμένη περίπτωση ισχύει (Furlani 2007a):

$$f(H) = \chi_p - \chi_f$$
, (52)

Γενικά, η αντικατάσταση της Εξ.(48) στην Εξ.(42) δίνει τη μαγνητική δύναμη σε ένα σωματίδιο θεωρώντας γραμμική απόκριση στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο:

$$\vec{F}_{m} = \mu_{o} V_{p} f(H) (\vec{H} \cdot \nabla) \vec{H} , \quad (53)$$

η οποία για μαγνητοστατικό πεδίο χωρίς κυκλοφορία, απλοποιείται σε:

$$\vec{F}_{m} = \mu_{o}V_{p}f(H)\nabla\left(\frac{\vec{H}^{2}}{2}\right)$$
, (54)

όπου το f(H) δίνεται από την Εξ.(49), ή αλλιώς, από μία από τις Εξ.(50)-(52) αναλόγως την εφαρμογή.

Η εξάρτηση του συντελεστή f από το H, είναι κάπως παραπλανητική. Η τιμή της συνάρτησης f(H) αλλάζει μόνο μεταξύ μη-κορεσμένης και κορεσμένης κατάστασης, δίνοντας έτσι τη γραμμική σχέση μεταξύ της μαγνήτισης του σωματιδίου και του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

### 3.3 Υπερ-παραμαγνητικό μοντέλο μαγνήτισης

Σε πολλές βιοϊατρικές εφαρμογές το υλικό των μαγνητικών σωματιδίων είναι σύνθετο, και το μαγνητικό συστατικό είναι διασκορπισμένο εντός πολυμερικής μήτρας (Neuberger et al. 2005; Thorek et al. 2006; Lu et al. 2007; Cengelli et al. 2010; Figuerola et al. 2010). Το μαγνητικό μέρος συνίσταται από σφαιρικά σωματίδια με διαμέτρους της τάξεως των νανομέτρων, τα οποία έχουν υπερ-παραμαγνητική συμπεριφορά υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Σαν αποτέλεσμα, η μαγνητική ροπή των σωματιδίων δε συμβαδίζει με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, λόγω της θερμικής διέγερσης.

Η μέση μαγνήτιση των μαγνητικών νανοσωματιδίων,  $M_{fm,p}$ , στην κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου  $\vec{H}$  δίνεται (Chen et al. 2007b; Bockenfeld et al. 2010):

$$M_{fm,p} = M_{fm,s}L(\alpha)$$
 , (55)

όπου  $L(\alpha)$  η συνάρτηση Langevin:

$$L(\alpha) = \operatorname{coth}(\alpha) - \frac{1}{\alpha}$$
. (56)

Η μεταβλητή α στη συνάρτηση Langevin, ονομάζεται μεταβλητή Langevin και ισούται με:

$$\alpha = \frac{\mu_{o}M_{fm,s}V_{sdp}\left(H - \frac{1}{3}\omega_{fm,p}M_{fm,p}\right)}{k_{B}T} , (57)$$

όπου Μ<sub>fm,s</sub> είναι η μαγνήτιση κορεσμού των μαγνητικών νανοσωματιδίων μέσα στο σύνθετο υλικό, V<sub>sdp</sub> είναι ο όγκος ενός νανοσωματιδίου, k<sub>B</sub> η σταθερά Boltzman και T η απόλυτη θερμοκρασία.

Στην προηγούμενη εξίσωση, ω<sub>fm,p</sub> είναι το κλάσμα όγκου των μαγνητικών νανοσωματιδίων στο σύνθετο σωματίδιο, το οποίο και σχετίζεται με το κλάσμα βάρους x<sub>fm,p</sub> μέσω της σχέσης:

$$\omega_{\text{fm,p}} = \frac{x_{\text{fm,p}}}{x_{\text{fm,p}} + (1 - x_{\text{fm,p}})\rho_{\text{fm,p}} / \rho_{\text{pol,p}}} ,$$
 (58)

με  $\rho_{fm,p}$  και  $\rho_{pol,p}$  οι πυκνότητες του μαγνητικού υλικού και πολυμερούς αντίστοιχα. Όταν το κλάσμα όγκου  $\omega_{fm,p}$  είναι μικρό, ο όρος  $1/3\omega_{fm,p}M_{fm,p}$  στην Εξ.(57), ο οποίος δείχνει την απομαγνήτιση ολόκληρου του σύνθετου σωματιδίου, μπορεί να παραληφθεί. Έτσι η Εξ.(55) γίνεται:

$$M_{fm,p} = M_{fm,s} \left[ coth \left( \frac{\mu_o M_{fm,s} V_{sdp} H}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{\mu_o M_{fm,s} V_{sdp} H} \right].$$
(59)

Η (συνολική) μαγνητική ροπή  $\overline{m}_p$  του σύνθετου σωματιδίου θα είναι (Cregg et al. 2012):

$$\vec{m}_{p} = \omega_{fm,p} V_{p} \frac{M_{fm,p}}{H} \vec{H}$$
, (60)

Αντικατάσταση στην Εξ.(37), λαμβάνοντας ακόμα υπόψη ότι  $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$  δίνει την ακόλουθη έκφραση για τη μαγνητική δύναμη στο σωματίδιο:

$$\vec{F}_{m} = \mu_{o} \omega_{fm,p} V_{p} \frac{M_{fm,p}}{H} \nabla \left(\frac{\mathrm{H}^{2}}{2}\right) \,. \mbox{ (61)}$$

#### 3.4 Μαγνητικά πεδία

Μαγνητικό πεδίο από σιδηρομαγνητικά καλώδια σε ομοιόμορφο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο

Με βάση την εργασία των Murariu et al. (2001), οι σχέσεις που περιγράφουν το μαγνητικό πεδίο από δύο ή τέσσερα σιδηρομαγνητικά (FerroMagnetic-FM) καλώδια, τα οποία μαγνητίζονται από ένα ομοιόμορφο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο  $\vec{H}_{\circ}$ , διατυπώνονται σε καρτεσιανές συντεταγμένες.

#### <u>2 καλώδια</u>

Το (αδιάστατο) μαγνητικό πεδίο, που παράγεται από δύο FM καλώδια τοποθετημένα σε ένα ομοιόμορφο μαγνητικό πεδίο έντασης Η<sub>₀</sub>, μπορεί να υπολογιστεί από το άθροισμα των μαγνητικών εντάσεων καθενός FM καλωδίου. Σε πολικές συντεταγμένες (r,θ) ισχύει (Σχ.2.2-2.3):

$$\begin{split} h_{r} &= \cos\theta + K_{w}r_{w}^{2} \Bigg[ \frac{\cos(2\theta_{1} - \theta)}{r_{1}^{2}} + \frac{\cos(2\theta_{2} - \theta)}{r_{2}^{2}} \Bigg] \hat{r} \\ h_{\theta} &= \sin\theta + K_{w}r_{w}^{2} \Bigg[ \frac{\sin(2\theta_{1} - \theta)}{r_{1}^{2}} + \frac{\sin(2\theta_{2} - \theta)}{r_{2}^{2}} \Bigg] \hat{\theta} \end{split}$$
(62)

όπου h<sub>r</sub> και h<sub>θ</sub> οι ακτινικές και γωνιακές συνιστώσες του αδιάστατου μαγνητικού πεδίου  $\vec{h} = \vec{H}/H_o$ , αντίστοιχα. Ο παράγοντας απομαγνήτισης, K<sub>w</sub>, είναι μια αδιάστατη σταθερά και εξαρτάται από τις μαγνητικές ιδιότητες του FM καλωδίου και το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Ισχύει K<sub>w</sub> = M<sub>w</sub> / 2H<sub>o</sub> στο κορεσμό και K<sub>w</sub> = 1 όταν το καλώδιο δεν είναι κορεσμένο (Rotariu et al. 2005; Hournkumnuard and Chantrapornchai 2011). Τέλος, M<sub>w</sub> είναι η μαγνήτιση και r<sub>w</sub> η ακτίνα του καλωδίου.



Σχήμα 2.2: Γεωμετρία και σύστημα συντεταγμένων για 2 FM καλώδια





Σε καρτεσιανές συντεταγμένες το (αδιάστατο) μαγνητικό γράφεται (Pilou 2012):

$$h_{x} = 1 + K_{w}r_{w}^{2} \left[ \frac{x^{2} - (y+l)^{2}}{(x^{2} + (y+l)^{2})^{2}} + \frac{x^{2} - (y-l)^{2}}{(x^{2} + (y-l)^{2})^{2}} \right]_{\hat{i}}$$
(63)  
$$h_{y} = K_{w}r_{w}^{2} \left[ \frac{2x(y+l)}{(x^{2} + (y+l)^{2})^{2}} + \frac{2x(y-l)}{(x^{2} + (y-l)^{2})^{2}} \right]_{\hat{j}}$$

#### <u>4 καλώδια (διάταξη 1)</u>

Ομοίως, υπολογίζεται το μαγνητικό πεδίο που παράγεται από 4 FM καλώδια σε διάταξη σταυρού σε ένα ομοιόμορφο μαγνητικό πεδίο. Σε πολικές συντεταγμένες:



Σχήμα 2.4: Γεωμετρία και σύστημα συντεταγμένων για 4 FM καλώδια (διάταξη 1)


Σχήμα 2.5: Λεπτομερές σύστημα συντεταγμένων για 4 FM καλώδια (διάταξη 1)

Και σε καρτεσιανές συντεταγμένες:

$$h_{x} = 1 + K_{w}r_{w}^{2} \left[ \frac{x^{2} - (y+l)^{2}}{\left(x^{2} + (y+l)^{2}\right)^{2}} + \frac{x^{2} - (y-l)^{2}}{\left(x^{2} + (y-l)^{2}\right)^{2}} + \frac{(x+l)^{2} - y^{2}}{\left((x+l)^{2} + y^{2}\right)^{2}} + \frac{(x-l)^{2} - y^{2}}{\left((x-l)^{2} + y^{2}\right)^{2}} \right] \hat{\mathbf{i}}$$

$$h_{y} = K_{w}r_{w}^{2} \left[ \frac{2x(y+l)}{\left(x^{2} + (y+l)^{2}\right)^{2}} + \frac{2x(y-l)}{\left(x^{2} + (y-l)^{2}\right)^{2}} + \frac{2(x+l)y}{\left((x+l)^{2} + y^{2}\right)^{2}} + \frac{2(x-l)y}{\left((x-l)^{2} + y^{2}\right)^{2}} \right] \hat{\mathbf{j}}$$
(65)

#### 4 καλώδια (διάταξη 2)

Για 4 καλώδια στη διάταξη που φαίνεται στο Σχ.2.6 έχουμε στις πολικές συντεταγμένες:

$$h_{r} = \left[\cos\theta + K_{w}r_{w}^{2}\sum_{i=1}^{4}\frac{\cos(2\theta_{i}-\theta)}{r_{i}^{2}}\right]\hat{r}$$

$$h_{\theta} = \left[-\sin\theta + K_{w}r_{w}^{2}\sum_{i=1}^{4}\frac{\sin(2\theta_{i}-\theta)}{r_{i}^{2}}\right]\hat{\theta}$$
(66)

Και στις καρτεσιανές:

$$h_{x} = 1 + K_{w}r_{w}^{2} \left[ \frac{(x - r_{w})^{2} - (y + 1)^{2}}{((x - r_{w})^{2} + (y + 1)^{2})^{2}} + \frac{(x - r_{w})^{2} - (y - 1)^{2}}{((x - r_{w})^{2} + (y - 1)^{2})^{2}} + \frac{(x + r_{w})^{2} - (y + 1)^{2}}{((x + r_{w})^{2} + (y + 1)^{2})^{2}} \right]_{1}^{1}$$

$$h_{y} = K_{w}r_{w}^{2} \left[ \frac{2(x - r_{w})(y + 1)}{((x - r_{w})^{2} + (y + 1)^{2})^{2}} + \frac{2(x - r_{w})(y - 1)}{((x - r_{w})^{2} + (y - 1)^{2})^{2}} + \frac{2(x + r_{w})(y - 1)}{((x + r_{w})^{2} + (y - 1)^{2})^{2}} + \frac{2(x + r_{w})(y + 1)}{((x + r_{w})^{2} + (y - 1)^{2})^{2}} \right]_{1}^{1}$$

$$\frac{W_{0}}{W_{0}} = \int_{0}^{1} \frac{1}{0} \int_{0}^$$

Σχήμα 2.6: Γεωμετρία και σύστημα συντεταγμένων για 4 FM καλώδια (διάταξη 2)





Στο Παράρτημα δίνεται αναλυτικά ο τρόπος προσδιορισμού των Εξ.(65) και (67).

Μαγνητικό πεδίο από κυλινδρικό μαγνήτη απείρου μήκους

Το μαγνητικό πεδίο που προκύπτει από κυλινδρικό μαγνήτη απείρου μήκους, μαγνήτισης M<sub>s</sub> και ακτίνας R<sub>mag</sub> δίνεται από τη σχέση (Furlani and Ng 2006b):

$$\begin{split} h_{y} &= \frac{M_{s}R_{mag}^{2}}{2} \frac{\left(y+d\right)^{2}-\left(z-I\right)^{2}}{\left(\left(y+d\right)^{2}+\left(z-I\right)^{2}\right)^{2}} \\ h_{z} &= \frac{M_{s}R_{mag}^{2}}{2} \frac{2\left(y+d\right)(z-I)}{\left(\left(y+d\right)^{2}+\left(z-I\right)^{2}\right)^{2}} \end{split} \tag{68} \\ h_{x} &= 0 \end{split}$$



Σχήμα 2.8: Γεωμετρία και σύστημα συντεταγμένων για κυλινδρικό μαγνήτη απείρου μήκους.

# 3.5 Μαγνητική ταχύτητα σωματιδίου

Η μαγνητική δύναμη, F<sub>m</sub>, προκαλεί κίνηση του σωματιδίου με «μαγνητική» ταχύτητα ίση με:

$$\vec{u}_m = \tau_p \vec{F}_m$$
 . (69)

Με την υπόθεση ότι το σωματίδιο είναι σφαιρικό, με διάμετρο, d<sub>p</sub>, και ομοιόμορφα μαγνητισμένο σε όλο τον όγκο του,  $V_p = \pi d_p^3 / 6$ , καθώς και ότι το ρευστό είναι ισοτροπικό και ελαφρά διαμαγνητικό υλικό, όπως νερό ή αέρας, και ότι δεν υπάρχουν ρεύματα στο ρευστό, τότε από τις Εξ.(40) και (41) η Εξ. (69) γίνεται:

$$\vec{u}_{m} = \frac{d_{p}^{2}\chi}{18\mu_{f}}\nabla\left(\frac{B^{2}}{2\mu_{o}}\right) , \quad (70)$$

ή ισοδύναμα,

$$\vec{u}_m = \frac{d_p^2 \chi}{18 \mu_f} \nabla \left( \frac{\mu_o H^2}{2} \right) . \quad (71)$$

Η μαγνητοφορητική κινητικότητα του σωματιδίου,  $\xi_p$  [m<sup>3</sup>s/kg], ορίζεται ως (Zborowski et al. 2002; Pankhurst et al. 2003):

$$\xi_{\rm p} \equiv \frac{\chi d_{\rm p}^2}{18\mu_{\rm f}} \quad (72)$$

Η μαγνητοφορητική κινητικότητα εξαρτάται από το πεδίο με τον ίδιο ακριβώς τρόπο όπως και η μαγνητική επιδεκτικότητα. Για το γραμμικό μοντέλο μαγνήτισης ισχύει:

$$\xi_{p,lmm} = \frac{d_p^2}{18\mu_f} f(H)$$
 , (73)

ενώ για υπερ-παραμαγνητικά σωματίδια:

$$\xi_{p,spm}\left(H\right) = \frac{d_p^2}{18\mu_f} \omega_{fm,p} \frac{M_{fm,p}}{H} . \quad (74)$$

Τέλος, η «μαγνητική» ταχύτητα του σωματιδίου (Εξ.(71)) γράφεται:

$$\vec{u}_{m} = \xi_{p} \nabla \left( \frac{\mu_{o} H^{2}}{2} \right)$$
 . (75)

# 3.6 Εξίσωση μεταφοράς στη μαγνητοφόριση

Εάν ληφθεί υπόψη και η «μαγνητική» ταχύτητα στην αδιάστατη μορφή της εξίσωσης μεταφοράς σωματιδίων (Εξ.(30)) έχουμε:

$$\int_{S} c \left\{ \vec{\upsilon} + St \left[ Fr^{-1} \left( 1 - \frac{\rho_{f}}{\rho_{p}} \right) \vec{g} - 0.5 \vec{\upsilon} \cdot \nabla \vec{\upsilon} \right] + 0.5 Mn_{p} \nabla \left( \frac{H^{2}}{2} \right) \right\} \cdot d\vec{S} = 0.5 Pe^{-1} \int_{S} \nabla c \cdot d\vec{S}$$
(76)

Η Εξ.(76) ενσωματώνει τις επιδράσεις της συναγωγής, της αδράνειας, της βαρυτικής καθίζησης, της μαγνητοφόρισης και της διάχυσης.

Χαρακτηριστικές ποσότητες προβλήματος		
μήκος διάμετρος σωλήνα, d <sub>t</sub>		
ταχύτητα	μέση ταχύτητα εισόδου ρευστού, $\upsilon_{o}$	
επιτάχυνση βαρύτητας	$g_{o} = 9.81  m/s^2$	
μαγνητικό πεδίο	H <sub>o</sub>	
συγκέντρωση	μέση συγκέντρωση εισόδου,  c <sub>o</sub>	

Πίνακας 3.1: Οι χαρακτηριστικές ποσότητες του προβλήματος που χρησιμοποιούνται για την αδιαστατοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς σωματιδίων.

Οι χαρακτηριστικές ποσότητες που χρησιμοποιούνται για την αδιαστατοποίηση της Εξ.(76) φαίνονται στον Πίνακα 3.1. Στην Εξ.(76) εμφανίζονται οι ακόλουθοι αδιάστατοι αριθμοί: ο αριθμός Stokes St =  $\tau_p \upsilon_o / r_t$ , ο αριθμός Peclet Pe =  $r_t \upsilon_o / D$  και ο αριθμός Froude Fr =  $\upsilon_o^2 / (r_t g_o)$ . Επιπρόσθετα, εμφανίζεται ένας καινούριος αδιάστατος αριθμός που σχετίζεται με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, ονομάζεται αριθμός μαγνήτισης σωματιδίου και δίνεται από τον τύπο:

$$Mn_{p} = \frac{\mu_{o}\xi_{p}H_{o}^{2}}{\upsilon_{o}r_{t}} \quad (77)$$

Εδώ να σημειωθεί ότι ενώ οι αριθμοί Stokes, Peclet και Froude εξαρτώνται μόνο από το μέγεθος των σωματιδίων, ο αριθμός μαγνήτισης σωματιδίου είναι και χωρική συνάρτηση του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου μέσω της μαγνητοφοριτικής κινητικότητας ξ<sub>p</sub>.

# 4 Εφαρμογές

Στο παρόν κεφάλαιο η πλήρως Eulerian μεθοδολογία που παρουσιάστηκε στα προηγούμενα κεφάλαια χρησιμοποιείται για να προβλέψει τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε ευθύγραμμους αγωγούς υπό την επίδραση διαφόρων μαγνητικών πεδίων. Συγκεκριμένα, υπολογίζεται για τις διάφορες συνθήκες η απόδοση συλλογής (Capture Efficiency-CE) των σωματιδίων, ή αλλιώς, λόγος εναπόθεσης, η οποία ορίζεται ως:

$$CE = 1 - \frac{\dot{c}\big|_{outlet}}{\dot{c}\big|_{inlet}} \ , \ (78)$$

όπου  $\dot{c} = \int_{S_t} c \vec{v}_p \cdot d \vec{S}_t$  η αδιάστατη παροχή σωματιδίων μέσω μιας περιοχής  $S_t$ 

της διατομής του αγωγού.

# 4.1 Μαγνητικό πεδίο παραγόμενο από διατάξεις FM καλωδίων

Στην παράγραφο αυτή η πλήρως Eulerian μεθοδολογία χρησιμοποιείται για να προβλέψει τη μεταφορά και εναπόθεση μαγνητικών σωματιδίων σε ευθύγραμμο κυκλικό σωλήνα υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου, παραγόμενου από δύο ή τέσσερα σιδηρομαγνητικά καλώδια που βρίσκονται σε εξωτερικό ομογενές μαγνητικό πεδίο.

#### 4.1.1 Δύο σιδηρομαγνητικά καλώδια

Η διάταξη αυτή, η οποία φαίνεται στο Σχ.3.1, αποτελεί ένα κομμάτι της συσκευής που προτάθηκε από τους Chen και συνεργάτες, και την οποία μελέτησαν τόσο πειραματικά όσο και αριθμητικά (Chen et al. 2007b; Chen et al. 2007c; Chen et al. 2008b; Chen et al. 2008c). Σε όλες τις προσομοιώσεις θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένο προφίλ ταχύτητας στην είσοδο του σωλήνα. Οι ιδιότητες του ρευστού και των σωματιδίων φαίνονται στο Πίνακα 3.1 και αυτές των καλωδίων και του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου στο Πίνακα 3.2.

Όπως φαίνεται και στον Πίνακα 3.1, το υλικό των μαγνητικών σωματιδίων είναι σύνθετο. Το μαγνητικό μέρος τους αποτελείται από σφαιρικά νανοσωματίδια διαμέτρου  $d_{fm,p} = 10$  nm. Τα σωματίδια αυτά εμφανίζουν υπερπαραμαγνητική συμπεριφορά υπό την επίδραση του επαγόμενου εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, οπότε η μαγνήτισή τους εκφράζεται μέσω της συνάρτησης Langevin (Εξ.(56)).

Παράμετροι σύγκρισης Α – 2 FM καλώδια		
Πυκνότητα ρευστού, ρ <sub>f</sub>	1000 kg/m <sup>3</sup>	
Ιξώδες ρευστού, μ <sub>f</sub>	1.0x10 <sup>-3</sup> kg/(ms)	
Θερμοκρασία ρευστού, Τ	298.15 K	
Μέση ταχύτητα ρευστού, υ₀	0.14 - 45.0, <u>5.0</u> cm/s	
Εσωτερική διάμετρος σωλήνα, d <sub>tin</sub>	0.75x10 <sup>-3</sup> m	
Εξωτερική διάμετρος σωλήνα, d <sub>tout</sub>	1.0x10 <sup>-3</sup> m	
Διάμετρος σφαίρας, d <sub>p</sub>	1.7 µm	
Μαγνητικό κλάσμα μάζας σφαίρας, x <sub>fm,p</sub>	12.45 %	
Υλικό FM σωματιδίου	Μαγνητίτης	
Πυκνότητα FM σωματιδίου, ρ <sub>fm,p</sub>	5050 Kg/m <sup>3</sup>	
Διάμετρος FM σωματιδίου, d <sub>fm,p</sub>	10nm	
Μαγνήτιση κορεσμού FM σωματιδίου, Μ <sub>fm,s</sub>	4.21x10 <sup>5</sup> A/m	
Πυκνότητα πολυμερούς, ρ <sub>ροι,ρ</sub>	1050 Kg/m <sup>3</sup>	

Πίνακας 3.1: Παράμετροι του ρευστού και των σωματιδίων για τη σύγκριση με Chen et al. (2007b). Οι παράμετροι της βασικής περίπτωσης είναι υπογραμμισμένες.

Παράμετροι σύνκρισης Β -	- 2 FM καλώδια
--------------------------	----------------

Υλικό καλωδίου	SS 304, nickel, <u>SS 430</u>
Ακτίνα καλωδίου, r <sub>w</sub>	0.125, <u>0.250</u> , 0.500 mm
Μαγνητική επαγωγή, μ <sub>ο</sub> Η <sub>ο</sub>	0.125 - <u>0.5</u> T

Πίνακας 3.2: Παράμετροι των καλωδίων και του εξωτερικού πεδίου στη σύγκριση με Chen et al. (2007b). Οι παράμετροι της βασικής περίπτωσης είναι υπογραμμισμένες.

Υλικό	Διάμετρος (mm)	M <sub>w,s</sub> (kA/m)
SS 304	0.50	828
SS 430	0.25	1300
SS 430	0.50	1342
SS 430	1.00	1268
Nickel	0.50	455

Πίνακας 3.3: Φυσικές ιδιότητες των φερομαγνητικών καλωδίων.



Σχήμα 3.1: Γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε από Chen et al. (2007b); Chen et al. (2008b); Chen et al. (2008c).

Στο Σχ.3.2 φαίνεται η απόδοση συλλογής, CE, συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου επαγωγής  $B_o = \mu_o H_o [T]$  για τα τρία διαφορετικά υλικά καλωδίου. Τα αποτελέσματα του Eulerian μοντέλου συγκρίνονται με τα πειραματικά και θεωρητικά αποτελέσματα των Chen et al. (2007b) για τις παραμέτρους της βασικής περίπτωσης (υπογραμμισμένες τιμές στους πίνακες). Διαπιστώνεται μια συστηματική υποτίμηση του κλάσματος εναπόθεσης που προβλέπει το Eulerian μοντέλο σε σχέση με τα πειραματικά αποτελέσματα. Η απόκλιση αυτή μειώνεται, όμως, με την αύξηση της έντασης του πεδίου και με τη χρήση υλικού χαμηλότερης μαγνήτισης κορεσμού (SS 304, nickel).

Γενικότερα από το Σχ.3.2 φαίνεται, πάντως, ότι ο λόγος αυξάνει με αύξηση της έντασης πεδίου και σταδιακά εξομαλύνεται (σε μεγάλες τιμές μέτρου μαγνητικού πεδίου), το οποίο και δείχνει το μαγνητικό κορεσμό των καλωδίων και όλου του συστήματος. Εκτός αυτού, στα διαγράμματα δεν παρατηρείται διαφορά στα υπολογιστικά αποτελέσματα μεταξύ των τριών υλικών μέχρι τη τιμή του πεδίου  $\mu_0H_0 = 0.30T$ , στην οποία το νικέλιο αποκλίνει από τα άλλα δύο. Αυτό δε συμβαίνει στα πειραματικά αποτελέσματα και πιθανά οφείλεται στην πολυπλοκότητα της μαγνήτισης των υλικών των καλωδίων, η οποία δεν έγινε δυνατό να αποτυπωθεί με τον απλουστευμένο τύπο μαγνήτισης που χρησιμοποιήθηκε.

Στο Σχ.3.3 φαίνεται το κλάσμα εναπόθεσης σα συνάρτηση της μέσης ταχύτητας του ρευστού,  $u_o$ , για τρεις διαφορετικές ακτίνες καλωδίων ( $r_w = 0.125, 0.25, 0.5 \text{ mm}$ ). Παράλληλα, εξετάστηκαν στα Σχ.3.4-3.5 τα μαγνητικά πεδία και η πυκνότητα μαγνητικής δύναμης στο σωλήνα για αυτές τις ακτίνες καλωδίων, έτσι ώστε να κατανοηθεί καλύτερα η διακύμανση του λόγου εναπόθεσης. Παρατηρείται, λοιπόν, ότι παρά τις μεγαλύτερες κλίσεις του μαγνητικού πεδίου όταν είναι μικρότερα τα καλώδια ο CE είναι χαμηλότερος και αυτό αποδίδεται στο μικρότερο εύρος που εμφανίζουν σε σχέση με τα μεγαλύτερα. Και στις τρεις περιπτώσεις, όμως, βλέπουμε σταθερή μείωση του CE με την αύξηση της μέσης ταχύτητας της ροής. Συγκριτικά με Chen et al. (2007b) φαίνεται σταθερή υποτίμηση, κι εδώ, της απόδοσης συλλογής, κυρίως με την αύξηση της μέσης ταχύτητας του ρευστού.



Σχήμα 3.2: Το κλάσμα εναπόθεσης συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου επαγωγής  $B_o = \mu_o H_o [T]$  για διάφορα υλικά καλωδίου: (α) SS 430, (β) SS 304, (γ) Nickel – Σύγκριση με αποτελέσματα του Chen et al. 2007b.



Σχήμα 3.3: Το κλάσμα εναπόθεσης συναρτήσει της μέσης ταχύτητας του ρευστού για διάφορες ακτίνες καλωδίων: (α)  $r_w = 0.125 \text{ mm}$ , (β)  $r_w = 0.250 \text{ mm}$ , (γ)  $r_w = 0.500 \text{ mm} - \Sigma$ ύγκριση με αποτελέσματα Chen et al. 2007b.



Σχήμα 3.4: Τα μαγνητικά πεδία για τις διάφορες ακτίνες FM καλωδίων: (α)  $r_w = 0.125 \text{ mm}$ , (β)  $r_w = 0.250 \text{ mm}$  και (γ)  $r_w = 0.500 \text{ mm}$ .



Σχήμα 3.5: Πυκνότητα μαγνητικής δύναμης στο σωλήνα για τις διάφορες ακτίνες FM καλωδίων: (α)  $r_w = 0.125 \text{ mm}$ ,(β)  $r_w = 0.250 \text{ mm}$ ,(γ)  $r_w = 0.500 \text{ mm}$ .

Συμπερασματικά, τα αποτελέσματα σε αυτήν την περίπτωση δείχνουν ότι το Eulerian μοντέλο ακολουθεί τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των πειραματικών καμπυλών σε όλες τις περιπτώσεις παρόλο που υποτιμά το κλάσμα εναπόθεσης.

#### 4.1.2 Τέσσερα σιδηρομαγνητικά καλώδια (2 διατάξεις)

Οι διατάξεις αυτές, οι οποίες φαίνονται στο Σχ.3.6, αποτελούν κομμάτι συσκευής, που προτάθηκε από τους Chen, Bockenfeld και συνεργάτες και μελετήθηκε πειραματικά και αριθμητικά (Chen et al. 2007a; Chen et al. 2008a; Bockenfeld et al. 2010). Ακολουθούν πίνακες με τις ιδιότητες ρευστού σωματιδίων και καλωδίων.

Στα Σχ.3.7-3.8 φαίνονται τα (αδιάστατα) μαγνητικά πεδία και η πυκνότητα μαγνητικής δύναμης για τις δύο διατάξεις των τεσσάρων καλωδίων στη διατομή του σωλήνα. Σημειώνεται ότι η συνιστώσα του μαγνητικού πεδίου κατά μήκος του σωλήνα είναι μηδενική καθώς τα καλώδια έχουν μεγάλο μήκος, και επίσης, αγνοούνται μαγνητικά φαινόμενα στις άκρες τους (fringe effects). Τα αποτελέσματα έρχονται σε συμφωνία, τόσο ποιοτικά όσο και ποσοτικά με τα αποτελέσματα της μελέτης του Chen et al. (2007a).

Παράμετροι σύγκρισης-Α – 4 FM καλώδια	
Πυκνότητα ρευστού, ρ <sub>f</sub>	1000 kg/m <sup>3</sup>
Ιξώδες ρευστού, μ <sub>f</sub>	1.0x10 <sup>-3</sup> kg/(ms)
Θερμοκρασία ρευστού, Τ	298.15 K
Μέση ταχύτητα ρευστού, υ₀	1.0 - 20.0, <u>5.0</u> cm/s
Εσωτερική διάμετρος σωλήνα, d <sub>tin</sub>	0.75x10 <sup>-3</sup> m
Εξωτερική διάμετρος σωλήνα, d <sub>tout</sub>	1.0x10⁻³ m
Διάμετρος σφαίρας, d <sub>p</sub>	1.7 µm
Μαγνητικό κλάσμα μάζας σφαίρας, x <sub>fm,p</sub>	12.45 %
Υλικό FM σωματιδίου	Μαγνητίτης
Πυκνότητα FM σωματιδίου, ρ <sub>fm,p</sub>	5050 Kg/m <sup>3</sup>
Διάμετρος FM σωματιδίου, d <sub>fm,p</sub>	10nm
Μαγνήτιση κορεσμού FM σωματιδίου, Μ <sub>fm,s</sub>	4.21x10 <sup>5</sup> A/m
Πυκνότητα πολυμερούς, ρ <sub>pol,p</sub>	1050 Kg/m <sup>3</sup>

Πίνακας 3.4: Παράμετροι ρευστού και σωματιδίων για σύγκριση με Chen et al. 2007a.

Παράμετροι σύγκρισης–Β – 4 FM καλώδια		
Υλικό καλωδίων	SS 430	
Ακτίνα καλωδίων, r <sub>w</sub>	0.50 mm	
Πυκνότητα μαγνητικού πεδίου, μ <sub>ο</sub> Η <sub>ο</sub>	0.125 - <u>0.44</u> T	

Πίνακας 3.5: Παράμετροι καλωδίων και εξωτερικού μαγνητικού πεδίου για σύγκριση με Chen et al. 2007a.



Σχήμα 3.6: Γεωμετρίες που χρησιμοποιήθηκαν από Chen et al. 2007a : (α) διάταξη – 1, (β) διάταξη – 2.



Σχήμα 3.7: Τα (αδιάστατα) μαγνητικά πεδία για τις δύο παραπάνω διατάξεις αντίστοιχα: (α) διάταξη-1 και (β) διάταξη-2.





Στα Σχ.3.9-3.10 φαίνονται οι τροχιές των σωματιδίων, οι οποίες διαφέρουν σημαντικά στα διαφορετικά επίπεδα καθώς και ανάμεσα στις δύο διαφορετικές διατάξεις που αναλύθηκαν. Για τη διάταξη-1 (Σχ.3.9) στο επίπεδο z = 0 τα σωματίδια κινούνται προς τα τοιχώματα, ενώ στο y = 0 απομακρύνονται από αυτά και συσσωρεύονται στο κέντρο. Στη διάταξη-2 (Σχ.3.10) συμβαίνει το αντίστροφο. Επίσης, φαίνεται ότι στη διάταξη-1 η εκτροπή των σωματιδίων λόγω του πεδίου είναι πιο έντονη.





- (β)
- Σχήμα 3.9: Οι τροχιές των μαγνητικών σφαιρών στο σωλήνα με τη διάταξη-1 : (α) στο επίπεδο z = 0, (β) στο y = 0 για τις βασικές συνθήκες προβλήματος. Το ρευστό και οι σφαίρες ρέουν από αριστερά προς τα δεξιά.



Σχήμα 3.10: Οι τροχιές των μαγνητικών σωματιδίων στο σωλήνα με τη διάταξη-2 : (α) στο επίπεδο z = 0, (β) στο y = 0.

Αντίστοιχα συμπεράσματα προκύπτουν και από την κατανομή της συγκέντρωσης των σωματιδίων στο τοίχωμα του σωλήνα για τις δύο διατάξεις (Σχ.3.11-3.12). Εδώ να σημειωθεί ότι τόσο τα σχήματα με τις τροχιές όσο κι αυτά με τη συγκέντρωση των σωματιδίων έχουν γίνει για τις βασικές συνθήκες του προβλήματος.



Σχήμα 3.11: Η κατανομή συγκέντρωσης των σωματιδίων στο τοίχωμα του σωλήνα με τη διάταξη-1 για τις βασικές συνθήκες του προβλήματος.







Σχήμα 3.12: Η κατανομή συγκέντρωσης των σωματιδίων στο τοίχωμα του σωλήνα με τη διάταξη-2.

Στα Σχ.3.13-3.14 απεικονίζεται το κλάσμα εναπόθεσης συναρτήσει της μέσης ταχύτητας ροής του ρευστού και της έντασης του μαγνητικού πεδίου αντίστοιχα για τις δύο διατάξεις των καλωδίων και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με αυτά των Chen et al. (2007a). Βλέπουμε ότι ανεξαρτήτου διάταξης αύξηση της ταχύτητας του ρευστού, u<sub>o</sub>, οδηγεί σε σταδιακή μείωση

του CE, ενώ αύξηση της έντασης του μαγνητικού πεδίου αυξάνει την εναπόθεση.



Σχήμα 3.13: Το κλάσμα εναπόθεσης σε συνάρτηση με τη μέση ταχύτητα του ρευστού για τις δύο διατάξεις των τεσσάρων καλωδίων: (α) διάταξη-1, (β) διάταξη-2 - Σύγκριση με τα πειραματικά και θεωρητικά αποτελέσματα του Chen et al. (2007a).



Σχήμα 3.14: Το κλάσμα εναπόθεσης ως συνάρτηση της έντασης του μαγνητικού πεδίου για τις δύο διαφορετικές διατάξεις: (α) διάταξη-1, (β) διάταξη-2 – Σύγκριση με Chen et al. 2007a.

Τα αποτελέσματα του Eulerian μοντέλου, δείχνουν ότι η διάταξη-1 απομακρύνει καλύτερα τα μαγνητικά σωματίδια από τη ροή, συμπέρασμα που βρίσκεται σε συμφωνία με τις εργασίες αναφοράς. Ωστόσο, και σε αυτές τις περιπτώσεις παρατηρείται ότι ενώ ποιοτικά τα αποτελέσματα του Eulerian μοντέλου συμφωνούν με τις πειραματικές καμπύλες ποσοτικά το παρόν μοντέλο υποεκτιμά το CE κυρίως σε μεγάλες ταχύτητες ρευστού και σε μικρότερες εντάσεις του μαγνητικού πεδίου.

Πιθανότατα, λοιπόν, να υπάρχει κάποιο φαινόμενο που σχετίζεται με τη ροή του ρευστού, το οποίο δε συμπεριλήφθηκε στο μοντέλο, και γίνεται

λιγότερο σημαντικό όταν αυξάνεται η επίδραση του μαγνητικού πεδίου. Η απόκλιση μπορεί, ακόμα, να οφείλεται στο ότι δε συμπεριλήφθηκε η επίδραση της διάτμησης στο μοντέλο, η οποία μάλιστα γίνεται ιδιαίτερα σημαντική σε μεγάλες ταχύτητες. Τέλος, ένας άλλος λόγος για τη διαφοροποίηση των αποτελεσμάτων ίσως είναι η έκφραση μαγνήτισης των καλωδίων και η παράλειψη των φαινομένων στα άκρα τους. Η απλοϊκή έκφραση που χρησιμοποιείται στο παρόν μοντέλο, αλλά και στους θεωρητικούς υπολογισμούς των εργασιών αναφοράς, δεν είναι σε θέση να αντικατοπτρίσει με ακρίβεια τη πραγματική διαδικασία μαγνήτισης τους. Μια πιο ομαλή προσέγγιση της μαγνήτισης των καλωδίων ίσως βελτίωνε την ακρίβεια του μοντέλου.

# 4.2 Μαγνητικό πεδίο από κυλινδρικό μαγνήτη απείρου μήκους

Στη συγκεκριμένη εφαρμογή το Euler μοντέλο χρησιμοποιείται για τη μελέτη της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων σε μικροκανάλι με υγρό μέσο που βρίσκεται υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου από κυλινδρικό μαγνήτη απείρου μήκους.

Η διάταξη αυτή, η οποία φαίνεται στο Σχ.3.15, μελετήθηκε από τους Furlani and Ng (2006b); Furlani and Furlani (2007b) με σκοπό την πρόβλεψη της μεταφοράς και εναπόθεσης θεραπευτικών νανοσωματιδίων στο ανθρώπινο μικροαγγειακό σύστημα. Για τις προσομοιώσεις θεωρείται Νευτώνειο ρευστό και στρωτή, πλήρως ανεπτυγμένη ροή. Οι ιδιότητες των σωματιδίων, του ρευστού και του μαγνήτη φαίνονται στο Πίνακα 3.6.

Στην εργασία αυτή υιοθετήθηκε γραμμικό μοντέλο μαγνήτισης για Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> σωματίδια. Λαμβάνοντας υπόψη τη Σχ.(51) και το μαγνητικό πεδίο σταθερό σε όλο τον όγκο ενός σωματιδίου, η μαγνητική δύναμη,  $\vec{F}_m$ , σε ένα σφαιρικό σωματίδιο διαμέτρου, d<sub>p</sub>, δίνεται από το τύπο:

$$\vec{F}_{m} = \begin{cases} 3\mu_{o} \frac{\pi d_{p}^{3}}{6} \nabla \left(\frac{H^{2}}{2}\right) & H < M_{sp} / 3 \\ \\ \mu_{o} \frac{\pi d_{p}^{3}}{6} \frac{M_{sp}}{H} \nabla \left(\frac{H^{2}}{2}\right) & H \ge M_{sp} / 3 \end{cases}$$
(79)

όπου  $M_{sp}$ η μαγνήτιση κορεσμού των σωματιδίων  $Fe_3O_4$  και  $H = |\vec{H}|$  το μέτρο του μαγνητικού πεδίου. Με βάση τις παραμέτρους του Πίνακα 3.6 διαπιστώνεται ότι τα σωματίδια δεν είναι κορεσμένα στην περίπτωση που εξετάζεται.

Στο Σχ.3.16 απεικονίζονται οι συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου καθώς και της μαγνητικής δύναμης κατά μήκος του άξονα του καναλιού. Παρατηρείται ότι η  $B_z$  παίρνει τη μέγιστη τιμή της πάνω από το κέντρο του μαγνήτη ( $x/R_{mag} = 0$ ), ενώ η  $B_x$  έχει κορυφές στις άκρες του ( $x/R_{mag} = \pm 1$ )

αλλάζοντας μάλιστα πρόσημο. Η οριζόντια συνιστώσα της μαγνητικής δύναμης,  $F_{mx}$ , εμφανίζει παρόμοιο προφίλ με τη  $B_x$  αλλά με διαφορετικό πρόσημο. Συνεπώς, ένα σωματίδιο που κινείται οριζόντια πάνω από το μαγνήτη επιταχύνεται αρχικά όταν τον συναντά και μετά επιβραδύνεται καθώς τον αφήνει πίσω του. Η κάθετη συνιστώσα  $F_{mz}$ , η οποία και είναι υπεύθυνη για την εναπόθεση των σωματιδίων, είναι πάντα αρνητική (ελκτική προς το μαγνήτη), και φυσικά πιο ισχυρή πάνω από το κέντρο του μαγνήτη ( $x/R_{mag} = 0$ ).Τα αποτελέσματα συγκρίνονται επιτυχώς με αυτά του Furlani and Ng (2006b).

Παράμετροι σύγκρισης	
Πυκνότητα ρευστού, ρ <sub>f</sub>	1066 kg/m <sup>3</sup>
Ιξώδες ρευστού, μ <sub>f</sub>	3.6x10 <sup>-3</sup> kg/(ms)
Θερμοκρασία ρευστού, Τ	298.15 K
Μέση ταχύτητα ρευστού, υ <sub>ο</sub>	1.5 cm/s
Εσωτερική διάμετρος σωλήνα, d <sub>tin</sub>	0.15x10 <sup>-3</sup> m
Διάμετρος σωματιδίου, d <sub>p</sub>	<u>200</u> - 1200 nm,
Πυκνότητα σωματιδίου, ρ <sub>p</sub>	5000 Kg/m <sup>3</sup>
Μαγνήτιση κορεσμού σωματιδίου, Μ <sub>sp</sub>	4.78x10 <sup>5</sup> A/m
Ακτίνα μαγνήτη, Rmag	2.0 cm
Απόσταση μαγνήτη-άξονα σωλήνα, d <sub>mag</sub>	2.5 - 4.5, <u>3.5</u> cm
Μαγνήτιση του μαγνήτη, M <sub>s</sub>	1.0x10 <sup>6</sup> A/m

Πίνακας 3.6: Παράμετροι ρευστού, σωματιδίων και μαγνήτη για τη σύγκριση με Furlani and Ng 2006b).



Σχήμα 3.15: Γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε από Furlani and Ng 2006b και Furlani and Furlani 2007b.



Σχήμα 3.16: Συνιστώσες : (α) του μαγνητικού πεδίου, (β) της μαγνητικής δύναμης κατά μήκος του άξονα του μικροκαναλιού.

Στο Σχ.3.17 απεικονίζονται οι τροχιές των σωματιδίων Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> με διαμέτρους d<sub>p</sub> = 300,500,700 mm (Σχ.3.17α) και d<sub>p</sub>=800,1000,1200 nm (Σχ.3.17β) για αποστάσεις του μαγνήτη από τον άξονα του καναλιού d<sub>mag</sub> = 3.0,4.0 cm αντίστοιχα. Στα διαγράμματα αυτά η ακτινική θέση, r = |z|, του σωματιδίου κανονικοποιείται με την ακτίνα του καναλιού, R<sub>t</sub>, και η αξονική θέση x με την ακτίνα του μαγνήτη, R<sub>mag</sub>. Σημείο εκκίνησης των σωματιδίων αποτελεί το μέσο στη διατομή εισόδου. Τα αποτελέσματα του Euler μοντέλου συγκρίνονται με αυτά του Furlani and Ng (2006b) και παρατηρούνται μόνο μικρές αποκλίσεις στις τροχιές.

Ομοίως, στα Σχ.3.18-3.19 γίνεται παραμετρική μελέτη των τροχιών των σωματιδίων με παραμέτρους το μέγεθός τους και την απόσταση του μαγνήτη. Στο Σχ.3.18 μελετώνται αποστάσεις μαγνήτη d<sub>mag</sub>=2.5,3.0,3.5cm και μεγέθη σωματιδίων d<sub>p</sub>=300,500,700cm, ενώ στο Σχ.3.19 απομακρύνεται ο μαγνήτης σε αποστάσεις d<sub>mag</sub>=4.0,4,5cm, και επομένως, δοκιμάζονται μεγαλύτερα σωματίδια διαμέτρων d<sub>p</sub>=800,1000,1200nm.

Στα διαγράμματα αυτά φαίνεται, λοιπόν, για κάθε θέση του μαγνήτη ποια σωματίδια εναποτίθενται στα τοιχώματα και ποια διαφεύγουν με βάση το μέγεθός τους. Γενικά παρατηρείται, όπως ήταν και αναμενόμενο, τα μικρότερα σωματίδια να διαφεύγουν, ενώ τα μεγαλύτερα να εναποτίθενται στα τοιχώματα. Αυτό οφείλεται στο ότι η μαγνητική δύναμη είναι ανάλογη του όγκου του σωματιδίου ( $V \propto R_p^3$ ). Επίσης, παρατηρείται μείωση των σωματιδίων που εναποτίθενται με την αύξηση της απόστασης του μαγνήτη. Η εναπόθεση γίνεται μάλιστα κυρίως στην περιοχή κάτω από την οποία είναι τοποθετημένος.



Σχήμα 3.17: Οι τροχιές των σωματιδίων που ξεκινούν από το μέσο του μικροκαναλιού συναρτήσει του μεγέθους τους για διαφορετικές αποστάσεις του κυλινδρικού μαγνήτη: (α) d<sub>mag</sub>=3cm, (β) d<sub>mag</sub>=4cm. Η συντεταγμένη-x της θέσης του μαγνήτη αντιστοιχεί στο σημείο 0 του άξονα-x – Σύγκριση με Furlani and Ng (2006b).



Σχήμα 3.18: Τροχιές σωματιδίων με σημείο εκκίνησης το μέσο του καναλιού συναρτήσει του μεγέθους των σωματιδίων και της απόστασης του μαγνήτη: (α) d<sub>mag</sub>=2.5cm, (β)d<sub>mag</sub>=3.0cm, (γ) d<sub>mag</sub>=3.5cm.



Σχήμα 3.19: Τροχιές σωματιδίων με σημείο εκκίνησης το μέσο του καναλιού συναρτήσει του μεγέθους των σωματιδίων και της απόστασης του μαγνήτη: (α) d<sub>mag</sub>=4.0cm, (β) d<sub>mag</sub>=4.5cm.

Το κλάσμα εναπόθεσης ως συνάρτηση του μεγέθους των σωματιδίων με παράμετρο την απόσταση του μαγνήτη φαίνεται στο Σχ.3.20. Παρατηρείται ότι με αύξηση της διαμέτρου των σωματιδίων ο λόγος εναπόθεσης αυξάνεται, ενώ αντίθετα όσο απομακρύνεται ο μαγνήτης ο λόγος μειώνεται.



Σχήμα 3.20: Το κλάσμα εναπόθεσης συναρτήσει της διαμέτρου των σωματιδίων για διάφορες αποστάσεις του κυλινδρικού μαγνήτη: (α) d<sub>mag</sub>=2.5,3,0,3.5cm, (β) d<sub>mag</sub>=4.0,4.5cm.

Στο Σχ.3.21 απεικονίζεται η κατανομή της συγκέντρωσης των σωματιδίων πάνω στο τοίχωμα με γωνία θέασης το επίπεδο y = 0 για διάφορα μεγέθη σωματιδίων ( $d_p$ =300,500,700nm) και απόσταση μαγνήτη  $d_{mag}$ =3.5cm.





(β)



(γ) Σχήμα 3.17: Η συγκέντρωση των σωματιδίων στο τοίχωμα για διαμέτρους σωματιδίου: (α) d<sub>p</sub> = 300, (β) d<sub>p</sub> = 500, (γ) d<sub>p</sub> = 700 nm και απόσταση μαγνήτη d = 3.5 cm.



(γ) Σχήμα 3.18: Η συγκέντρωση των σωματιδίων στο τοίχωμα για διάμετρο σωματιδίου d<sub>p</sub> = 500 nm και απόσταση μαγνήτη (α) d<sub>mag</sub> = 2.5 cm, (β) d<sub>mag</sub> = 3.0 cm, (γ) d<sub>mag</sub> = 3.5 cm.

Πρόσθετα στο Σχ.3.22 φαίνεται η κατανομή συγκέντρωσης των σωματιδίων κοντά στο τοίχωμα απομακρύνοντας σταδιακά το μαγνήτη από το μικροκανάλι ( $d_{mag}$  = 2.5, 3.0, 3.5 cm) για σωματίδια διαμέτρου  $d_p$  = 500 nm.

Από την κατανομή συγκέντρωσης των σωματιδίων παρατηρείται ότι αυτά συσσωρεύονται κυρίως στο κάτω μέρος στο μέσο του μικροκαναλιού κάτω από το οποίο είναι τοποθετημένος ο κυλινδρικός μαγνήτης. Μάλιστα όσο πιο μεγάλα είναι τα σωματίδια ή ο μαγνήτης πλησιάζει το κανάλι η συγκέντρωση είναι μεγαλύτερη λίγο πριν και ακριβώς πάνω από το μέσο, ενώ αλλιώς απλώνονται περισσότερο γύρω και πέρα από το μέσο του μικροκαναλιού. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι τα σωματίδια αργούν να εναποτεθούν ή δεν εναποτίθενται καθόλου, λόγω της ασθενέστερης μαγνητικής δύναμης.

# 5 Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία προσομοιώθηκε η ροή συστήματος υγρούσωματιδίων σε ευθύγραμμο αγωγό διαφόρων γεωμετριών (διαφόρων μηκών και διαμέτρων) για διάφορες συνθήκες ροής (πυκνότητα, ιξώδες, μέση ταχύτητα ροής) υπό την επίδραση μαγνητικών πεδίων (σιδηρομαγνητικά καλώδια, κυλινδρικός μαγνήτης). Η προσομοίωση έγινε με τεχνικές υπολογιστικής ρευστοδυναμικής με περιγραφή κατά Euler. Σχετικά με τα σωματίδια εξετάστηκε, πως επηρεάζει κατά βάση το μέγεθός τους την εναπόθεση στους αγωγούς. Όσον αφορά τα πεδία, μελετήθηκαν η επίδραση της διαμέτρου και του υλικού των καλωδίων, διαφορετικές διατάξεις αυτών γύρω από το σωλήνα, καθώς και ο ρόλος της θέσης του κυλινδρικού μαγνήτη. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με πειραματικά και υπολογιστικά δεδομένα που βρέθηκαν στη βιβλιογραφία.

Στη σύγκριση με Chen et al. (2007b) το αναπτυχθέν Euler μοντέλο χρησιμοποιείται για να προβλέψει τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε υγρό μέσο που ρέει σε ευθύγραμμο σωλήνα κυκλικής διατομής υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου προκαλούμενο από δύο σιδηρομαγνητικά καλώδια σε ομοιόμορφο εξωτερικό πεδίο. Παρατηρείται ότι με αύξηση της ακτίνας των καλωδίων ή της έντασης του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου η εναπόθεση αυξάνει. Αντίθετα, η αύξηση της μέσης ταχύτητας ροής δυσκολεύει την εναπόθεση. Επίσης, μελετήθηκε η επίδραση του υλικού των σιδηρομαγνητικών καλωδίων, προκειμένου να διαπιστωθεί ποιο θα ήταν το πιο κατάλληλο σε μια πιθανή εφαρμογή. Από τα αποτελέσματα τόσο του Euler μοντέλου όσο και αυτού του Chen και συνεργατών φάνηκε ότι η πολυπλοκότητα της μαγνήτισης των υλικών των καλωδίων δεν μπορεί να αποτυπωθεί πλήρως με τον απλουστευμένο τύπο μαγνήτισης που χρησιμοποιήθηκε.

Στη συνέχεια μελετάται σύστημα με τέσσερα σιδηρομαγνητικά καλώδια σε δύο διαφορετικές διατάξεις γύρω από το σωλήνα κατά αναλογία με Chen et al. (2007a). Στην εφαρμογή αυτή συγκρίνονται η εναπόθεση, η κατανομή της συγκέντρωσης και οι τροχιές των σωματιδίων για τις δύο αυτές διατάξεις για διάφορες ταχύτητες ροής και εντάσεις εξωτερικού πεδίου. Διαπιστώνεται, λοιπόν, ότι η διάταξη με τα καλώδια σε σχήμα σταυρού είναι η πιο αποτελεσματική, ενώ οι επιδράσεις της ταχύτητας του ρευστού και της έντασης του μαγνητικού πεδίου είναι ανάλογες με τη προηγούμενη εφαρμογή, όπως αναμενόταν εξάλλου. Από τις τροχιές και την κατανομή των σωματιδίων παρατηρείται ότι αυτά εναποτίθενται σε διαφορετικά σημεία του αγωγού σε κάθε διάταξη και αυτό έχει να κάνει με το προσανατολισμό του εκάστοτε πεδίου.

Και στις δύο συγκρίσεις με τις εργασίες των Chen και συνεργατών τα αποτελέσματα του Euler μοντέλου, ενώ ποιοτικά ακολουθούν πιστά τα πειράματα και τις προσομοιώσεις, υποεκτιμούν συστηματικά το λόγο εναπόθεσης των σωματιδίων. Η απόκλιση αυτή από τα πειραματικά αποτελέσματα αυξάνει όσο μεγαλώνει η ταχύτητα του ρευστού και μειώνεται η ένταση του μαγνητικού πεδίου, το οποίο μπορεί να σημαίνει ότι υπάρχει κάποιος μηχανισμός εναπόθεσης που σχετίζεται με τη ροή του ρευστού, ο οποίος ενώ υπάρχει στα πειράματα δε συμπεριλήφθηκε στο μοντέλο. Επίσης, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, η αναλυτική έκφραση της μαγνήτισης των καλωδίων δεν μπορεί να αποτυπώσει πλήρως τον πολύπλοκο τρόπο, με τον οποίο αυτά μαγνητίζονται στη πραγματικότητα, και επομένως πιθανότατα συμβάλει στη διαφορά αποτελεσμάτων.

Εκτός από τα σιδηρομαγνητικά καλώδια εξετάστηκε και η επίδραση ενός υπεραγώγιμου κυλινδρικού μαγνήτη απείρου μήκους στη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε μικροκανάλι και τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με αυτά του Furlani (2006a). Συγκεκριμένα, μελετήθηκαν οι τροχιές, η συγκέντρωση και η εναπόθεση των σωματιδίων και πως αυτά επηρεάζονται από το μέγεθός τους και τη θέση του μαγνήτη. Από τα αποτελέσματα φάνηκε ότι τα σωματίδια εναποτίθενται πιο νωρίς όσο αυξάνει το μέγεθός τους ή ο μαγνήτης πλησιάζει τον αγωγό. Μάλιστα, η εναπόθεση γίνεται κυρίως στην περιοχή του μικροκαναλιού, κάτω από την οποία είναι τοποθετημένος ο μαγνήτης. Ακόμα, παρατηρήθηκε για ποια μεγέθη τα σωματίδια εναποτίθενται και για ποια όχι με μια δεδομένη θέση του μαγνήτη.

Στη σύγκριση που έγινε μεταξύ του Euler μοντέλου και των προσομοιώσεων των Furlani και Ng διαπιστώθηκε πολύ καλή συμφωνία αποτελεσμάτων. Οι τροχιές των σωματιδίων στα δύο μοντέλα είναι ποιοτικά ίδιες, αλλά και ποσοτικά βρίσκονται πολύ κοντά μεταξύ τους.

Γενικά, σε όλες τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν το αναπτυχθέν Euler μοντέλο περιγράφει επιτυχώς τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της μεταφοράς και εναπόθεσης των σωματιδίων. Παρατηρείται βέβαια μια υποτίμηση του κλάσματος εναπόθεσης σε σχέση με τις πειραματικές μετρήσεις από παλαιότερες εργασίες, η οποία μπορεί να δείχνει ότι υπάρχει κάποιος μηχανισμός εναπόθεσης σε υγρό που έχει παραληφθεί από το μοντέλο. Μία άλλη εξήγηση για τη μεγαλύτερη εναπόθεση στα πειράματα θα μπορούσε να είναι η συνάθροιση των μαγνητικών σωματιδίων υπό την επίδραση του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Κατά αυτόν τον τρόπο, η ίδια πυκνότητα δύναμης θα εφαρμοζόταν σε μεγαλύτερα σωματίδια, ενισχύοντας το τρόπο με τον οποίο αυτά εναποτίθενται στα τοιχώματα. Η μεταφορά σωματιδίων σε υγρό μέσο και τα διάφορα φυσικά φαινόμενα που εμπλέκονται θα πρέπει, λοιπόν, να μελετηθούν εκτενέστερα σε επόμενες εργασίες.

### Μαγνητικό πεδίο από σιδηρομαγνητικά καλώδια

#### 4 καλώδια (διάταξη 1)

Το συνολικό μαγνητικό πεδίο που παράγεται από τέσσερα FM καλώδια σε ένα ομοιόμορφο εξωτερικό πεδίο θα είναι της μορφής:

$$\vec{H} = \vec{H}_{o} + \sum_{i=1}^{4} \vec{H}_{i}^{*}$$
 , (80)

όπου  $\vec{H}_{i}^{*}$  το μαγνητικό πεδίο του καλωδίου i. Προκειμένου να υπολογίσουμε τις ακτινικές και γωνιακές συντεταγμένες του  $\vec{H}$ , απαιτείται η έκφραση του μαγνητικού πεδίου του κάθε καλωδίου στο πολικό σύστημα συντεταγμένων (r,θ). Το σύστημα συντεταγμένων και οι συνιστώσες του vecH φαίνονται στο Σχ.2.5. Αγνοώντας τους όρους του εξωτερικού πεδίου ισχύει:

$$h_{r_{i}}^{*} = K_{w} \frac{r_{w}^{2}}{r_{i}^{2}} \cos \theta_{i}$$

$$h_{\theta_{i}}^{*} = K_{w} \frac{r_{w}^{2}}{r_{i}^{2}} \sin \theta_{i}$$
(81)

Από το Σχ.2.5 συνάγεται ότι:

$$\phi_{1} = \pi - \left[ \left( \pi/2 - \theta_{1} \right) + \left( \pi/2 + \theta \right) \right] = \theta_{1} - \theta$$

$$\phi_{2} = \pi - \left[ \left( \pi/2 - \theta \right) + \left( \pi/2 + \theta_{2} \right) \right] = -\left( \theta_{2} - \theta \right)$$

$$\phi_{3} = \pi - \left[ \left( \theta_{3} \right) + \left( \pi - \theta \right) \right] = -\left( \theta_{3} - \theta \right)$$

$$\phi_{4} = \pi - \left[ \left( \theta \right) + \left( \pi - \theta_{4} \right) \right] = \theta_{4} - \theta$$
(82)

Έτσι στο (r,θ) σύστημα:

 $\text{ frou } h^*_{r_ir} = h^*_{r_i} \cdot \cos \varphi_i \,, \ h^*_{\theta_ir} = h^*_{\theta_i} \cdot \sin \varphi_i \,, \ h^*_{r_i\theta} = h^*_{r_i} \cdot \sin \varphi_i \, \, \text{ for } h^*_{\theta_i\theta} = h^*_{\theta_i} \cdot \cos \varphi_i \,.$ 

Λαμβάνοντας, ακόμα υπόψη τις τριγωνομετρικές ταυτότητες:

$$\begin{aligned}
\cos(\theta - \theta_{i}) &= \cos(\theta_{i} - \theta) \\
\sin(\theta - \theta_{i}) &= -\sin(\theta_{i} - \theta) \\
\cos(\theta_{i} - \theta) &= \cos\theta_{i}\cos\theta + \sin\theta_{i}\sin\theta \\
\sin(\theta_{i} - \theta) &= \sin\theta_{i}\cos\theta - \cos\theta_{i}\sin\theta
\end{aligned}$$
(84)

Η Εξ.<mark>(83)</mark> γίνεται:

$$\begin{aligned} h_{r}^{*} &= \sum_{i=1}^{4} \left[ h_{r_{i}}^{*} \cos(\theta_{i} - \theta) - h_{\theta_{i}}^{*} \sin(\theta_{i} - \theta) \right] \\ h_{\theta}^{*} &= \sum_{i=1}^{4} \left[ h_{r_{i}}^{*} \sin(\theta_{i} - \theta) - h_{\theta_{i}}^{*} \cos(\theta_{i} - \theta) \right] \end{aligned}$$
(85)

Με αντικατάσταση της Εξ.(81) και χρησιμοποιώντας τις δύο τελευταίες ταυτότητες της Εξ.(84)

$$h_{r}^{*} = K_{w}r_{w}^{2}\sum_{i=1}^{4} \frac{\cos(2\theta_{i}-\theta)}{r_{i}^{2}}$$

$$h_{\theta}^{*} = K_{w}r_{w}^{2}\sum_{i=1}^{4} \frac{\sin(2\theta_{i}-\theta)}{r_{i}^{2}}$$
(86)

Με την πρόσθεση και του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου

$$\begin{split} h_{r} &= \left[\cos\theta + K_{w}r_{w}^{2}\sum_{i=1}^{4}\frac{\cos(2\theta_{i}-\theta)}{r_{i}^{2}}\right]\hat{r} \\ h_{\theta} &= \left[-\sin\theta + K_{w}r_{w}^{2}\sum_{i=1}^{4}\frac{\sin(2\theta_{i}-\theta)}{r_{i}^{2}}\right]\hat{\theta} \end{split} \tag{87}$$

Από το πολικό στο καρτεσιανό σύστημα

Από Σχ.2.4

$$\begin{aligned} h_{x} &= \cos\theta h_{r} - \sin\theta h_{\theta} \\ h_{y} &= \sin\theta h_{r} - \cos\theta h_{\theta} \end{aligned} \tag{88}$$

και επειδή

$$\frac{\cos(2\theta_{i}) = \cos^{2}\theta_{i} - \sin^{2}\theta_{i}}{\sin(2\theta_{i}) = 2\sin\theta_{i}\cos\theta_{i}}$$
(89)
η Εξ.<mark>(88)</mark> γράφεται

$$\begin{aligned} h_{x} &= 1 + K_{w} r_{w}^{2} \sum_{i=1}^{4} \frac{cos(2\theta_{i})}{r_{i}^{2}} \\ h_{y} &= K_{w} r_{w}^{2} \sum_{i=1}^{4} \frac{sin(2\theta_{i})}{r_{i}^{2}} \end{aligned} \tag{90}$$

Από το Σχ.2.5 για το καλώδιο 1 ισχύει:

$$r_{1} = |O_{1}P| = \sqrt{x^{2} + (y+l)^{2}}$$

$$\cos \theta_{1} = x/r_{1} \qquad (91)$$

$$\sin \theta_{1} = (y+l)/r_{1}$$

για το καλώδιο 2:

$$r_{2} = |O_{2}P| = \sqrt{x^{2} + (y - I)^{2}}$$

$$\cos \theta_{2} = x/r_{2} \qquad (92)$$

$$\sin \theta_{2} = (y - I)/r_{2}$$

για το καλώδιο 3:

$$r_{3} = |O_{3}P| = \sqrt{(x+I)^{2} + y^{2}}$$
  

$$\cos \theta_{3} = (x+I)/r_{3} \quad (93)$$
  

$$\sin \theta_{3} = y/r_{3}$$

και για το καλώδιο 4:

$$r_{4} = |O_{4}P| = \sqrt{(x-I)^{2} + y^{2}}$$
  

$$\cos \theta_{4} = (x-I)/r_{4} \qquad (94)$$
  

$$\sin \theta_{4} = y/r_{4}$$

Έτσι έχουμε για καλώδιο 1:

$$\frac{\cos(2\theta_{1})}{r_{1}^{2}} = \frac{\cos^{2}\theta_{1} - \sin^{2}\theta_{1}}{r_{1}^{2}} = \frac{x^{2} - (y + I)^{2}}{(x^{2} + (y + I)^{2})^{2}}$$

$$\frac{\sin(2\theta_{1})}{r_{1}^{2}} = \frac{2\sin\theta_{1}\cos\theta_{1}}{r_{1}^{2}} = \frac{2x(y + I)}{(x^{2} + (y + I)^{2})^{2}}$$
(95)

καλώδιο 2:

$$\frac{\cos(2\theta_{2})}{r_{2}^{2}} = \frac{\cos^{2}\theta_{2} - \sin^{2}\theta_{2}}{r_{2}^{2}} = \frac{x^{2} - (y - I)^{2}}{(x^{2} + (y - I)^{2})^{2}}$$

$$\frac{\sin(2\theta_{2})}{r_{2}^{2}} = \frac{2\sin\theta_{2}\cos\theta_{2}}{r_{2}^{2}} = \frac{2x(y - I)}{(x^{2} + (y - I)^{2})^{2}}$$
(96)

καλώδιο 3:

$$\frac{\cos(2\theta_{3})}{r_{3}^{2}} = \frac{\cos^{2}\theta_{3} - \sin^{2}\theta_{3}}{r_{3}^{2}} = \frac{(x+l)^{2} - y^{2}}{\left(\left(x+l\right)^{2} + y^{2}\right)^{2}}$$

$$\frac{\sin(2\theta_{3})}{r_{3}^{2}} = \frac{2\sin\theta_{3}\cos\theta_{3}}{r_{3}^{2}} = \frac{2(x+l)y}{\left(\left(x+l\right)^{2} + y^{2}\right)^{2}}$$
(97)

καλώδιο 4:

$$\frac{\cos(2\theta_{4})}{r_{4}^{2}} = \frac{\cos^{2}\theta_{4} - \sin^{2}\theta_{4}}{r_{4}^{2}} = \frac{(x-l)^{2} - y^{2}}{\left(\left(x-l\right)^{2} + y^{2}\right)^{2}}$$
(98)  
$$\frac{\sin(2\theta_{4})}{r_{4}^{2}} = \frac{2\sin\theta_{4}\cos\theta_{4}}{r_{4}^{2}} = \frac{2(x-l)y}{\left(\left(x-l\right)^{2} + y^{2}\right)^{2}}$$

Σε καρτεσιανές συντεταγμένες το (αδιάστατο) μαγνητικό πεδίο της Εξ.(87) γράφεται λοιπόν:

$$h_{x} = 1 + K_{w}r_{w}^{2} \left[ \frac{x^{2} - (y+l)^{2}}{\left(x^{2} + (y+l)^{2}\right)^{2}} + \frac{x^{2} - (y-l)^{2}}{\left(x^{2} + (y-l)^{2}\right)^{2}} + \frac{(x+l)^{2} - y^{2}}{\left((x+l)^{2} + y^{2}\right)^{2}} + \frac{(x-l)^{2} - y^{2}}{\left((x-l)^{2} + y^{2}\right)^{2}} \right] \hat{h}_{y} = K_{w}r_{w}^{2} \left[ \frac{2x(y+l)}{\left(x^{2} + (y+l)^{2}\right)^{2}} + \frac{2x(y-l)}{\left(x^{2} + (y-l)^{2}\right)^{2}} + \frac{2(x+l)y}{\left((x+l)^{2} + y^{2}\right)^{2}} + \frac{2(x-l)y}{\left((x-l)^{2} + y^{2}\right)^{2}} \right] \hat{j}$$
(99)

4 καλώδια (διάταξη 2)

Για τη δεύτερη διάταξη έχουμε από Σχ.2.7

$$\phi_{1} = \pi - \left[ \left( \theta \right) + \left( \pi - \theta_{1} \right) \right] = \theta_{1} - \theta$$

$$\phi_{2} = \pi - \left[ \left( \theta_{2} \right) + \left( \pi - \theta \right) \right] = -\left( \theta_{2} - \theta \right)$$

$$\phi_{3} = \pi - \left[ \left( \theta_{3} \right) + \left( \pi - \theta \right) \right] = -\left( \theta_{3} - \theta \right)$$

$$\phi_{4} = \pi - \left[ \left( \theta \right) + \left( \pi - \theta_{4} \right) \right] = \theta_{4} - \theta$$
(100)

και ομοίως με τα προηγούμενα καταλήγουμε

$$\begin{split} h_{r} &= \left[ \cos\theta + K_{w} r_{w}^{2} \sum_{i=1}^{4} \frac{\cos(2\theta_{i} - \theta)}{r_{i}^{2}} \right] \hat{r} \\ h_{\theta} &= \left[ -\sin\theta + K_{w} r_{w}^{2} \sum_{i=1}^{4} \frac{\sin(2\theta_{i} - \theta)}{r_{i}^{2}} \right] \hat{\theta} \end{split} \tag{101}$$

## Από το πολικό στο καρτεσιανό σύστημα

Από το Σχ.2.7 για το καλώδιο 1 ισχύει:

$$r_{1} = |O_{1}P| = \sqrt{(x - r_{w})^{2} + (y + I)^{2}}$$

$$\cos \theta_{1} = (x - r_{w})/r_{1} \qquad (102)$$

$$\sin \theta_{1} = (y + I)/r_{1}$$

για το καλώδιο 2:

$$r_{2} = |O_{2}P| = \sqrt{(x - r_{w})^{2} + (y - I)^{2}}$$
  

$$\cos \theta_{2} = (x - r_{w})/r_{2}$$
(103)  

$$\sin \theta_{2} = (y - I)/r_{2}$$

για το καλώδιο 3:

$$r_{3} = |O_{3}P| = \sqrt{(x + r_{w})^{2} + (y - l)^{2}}$$

$$\cos \theta_{3} = (x + r_{w})/r_{3} \quad (104)$$

$$\sin \theta_{3} = (y - l)/r_{3}$$

και για το καλώδιο 4:

$$r_{4} = |O_{4}P| = \sqrt{(x + r_{w})^{2} + (y + I)^{2}}$$

$$\cos \theta_{4} = (x + r_{w})/r_{4} \qquad (105)$$

$$\sin \theta_{4} = (y + I)/r_{4}$$

Έτσι, σε καρτεσιανές συντεταγμένες το (αδιάστατο) μαγνητικό πεδίο γράφεται:

$$\begin{split} h_{x} &= 1 + K_{w} r_{w}^{2} \Bigg[ \frac{\left(x - r_{w}\right)^{2} - \left(y + l\right)^{2}}{\left(\left(x - r_{w}\right)^{2} + \left(y + l\right)^{2}\right)^{2}} + \frac{\left(x - r_{w}\right)^{2} - \left(y - l\right)^{2}}{\left(\left(x - r_{w}\right)^{2} + \left(y - l\right)^{2}\right)^{2}} + \frac{\left(x + r_{w}\right)^{2} - \left(y + l\right)^{2}}{\left(\left(x + r_{w}\right)^{2} + \left(y - l\right)^{2}\right)^{2}} \Bigg]^{1} \\ h_{y} &= K_{w} r_{w}^{2} \Bigg[ \frac{2(x - r_{w})(y + l)}{\left(\left(x - r_{w}\right)^{2} + \left(y + l\right)^{2}\right)^{2}} + \frac{2(x - r_{w})(y - l)}{\left(\left(x - r_{w}\right)^{2} + \left(y - l\right)^{2}\right)^{2}} + \frac{2(x + r_{w})(y - l)}{\left(\left(x + r_{w}\right)^{2} + \left(y - l\right)^{2}\right)^{2}} + \frac{2(x + r_{w})(y + l)}{\left(\left(x + r_{w}\right)^{2} + \left(y - l\right)^{2}\right)^{2}} \Bigg]^{1} \end{split}$$

$$(106)$$

## Βιβλιογραφία

- Bockenfeld, D., H. Chen, et al. (2010). "A Parametric study of a portable magnetic separator for separation of nanospheres from circulatory system." <u>Separation Science and Technology</u> **45**(3): 355-363.
- Cengelli, F., F. Voinesco, et al. (2010). "Interaction of cationic ultrasmall superparamagnetic iron oxide nanoparticles with human melanoma cells." <u>Nanomedicine</u> **5**(7): 1075-1087.
- Chen, H., D. Bockenfeld, et al. (2008a). "Preliminary 3-D analysis of a high gradient magnetic separator for biomedical applications." Journal of Magnetism and Magnetic Materials **320**(3-4): 279-284.
- Chen, H., D. Bockenfeld, et al. (2007a). "Three-dimensional modeling of a portable medical device for magnetic separation of particles from biological fluids." <u>Physics in Medicine and Biology</u> **52**(17): 5205-5218.
- Chen, H., A. D. Ebner, et al. (2007b). "A comprehensive in vitro investigation of a portable magnetic separator device for human blood detoxification." <u>Physics in Medicine and Biology</u> **52**(19): 6053-6072.
- Chen, H., A. D. Ebner, et al. (2008b). "Theoretical analysis of a magnetic separator device for ex-vivo blood detoxification." <u>Separation Science</u> and Technology **43**(5): 996-1020.
- Chen, H., M. D. Kaminski, et al. (2007c). "Magnetic separation of microspheres from viscous biological fluids." <u>Physics in Medicine and</u> <u>Biology</u> **52**(4): 1185-1196.
- Chen, H., M. D. Kaminski, et al. (2007e). "A novel human detoxification system based on nanoscale bioengineering and magnetic separation techniques." <u>Medical Hypotheses</u> **68**(5): 1071-1079.
- Chen, H., M. D. Kaminski, et al. (2008c). "2D modeling and preliminary in vitro investigation of a prototype high gradient magnetic separator for biomedical applications." <u>Medical Engineering and Physics</u> **30**(1): 1-8.
- Chen, W., D. P. Cormode, et al. (2011). "Nanoparticles as magnetic resonance imaging contrast agents for vascular and cardiac diseases." <u>Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology</u> 3(2): 146-161.
- Cohen Stuart, D. C., C. R. Kleijn, et al. (2011). "An efficient and robust method for Lagrangian magnetic particle tracking in fluid flow simulations on unstructured grids." <u>Computers & Fluids</u> **40**(1): 188-194.
- Cregg, P. J., K. Murphy, et al. (2012). "Inclusion of interactions in mathematical modelling of implant assisted magnetic drug targeting." <u>Applied Mathematical Modelling</u> **36**: 1-34.
- Drossinos, Y. and C. Housiadas (2006). <u>Multiphase Flow Handbook</u>, CRC Press, Boca Raton.
- Duran, J. D. G., J. L. Arias, et al. (2008). "Magnetic colloids as drug vehicles." Journal of Pharmaceutical Sciences **97**(8): 2948-2983.
- Ferziger, J. and M. Peric (2002). <u>Computational Methods for Fluid Dynamics</u>. Germany, Springer.
- Figuerola, A., R. Di Corato, et al. (2010). "From iron oxide nanoparticles towards advanced iron-based inorganic materials designed for biomedical applications." <u>Pharmacological Research</u> **62**(2): 126-143.
- Friedlander, S. (2000). <u>Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of aerosol</u> <u>dynamics</u>. New York, NY, Oxford University Press.

- Furlani, E. J. and E. P. Furlani (2007b). "A model for predicting magnetic targeting of multifunctional particles in the microvasculature." <u>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</u> **312**(1): 187-193.
- Furlani, E. P. (2006a). "Analysis of particle transport in a magnetophoretic microsystem." Journal of Applied Physics **99**(2): 1-11.
- Furlani, E. P. (2007a). "Magnetophoretic separation of blood cells at the microscale." Journal of Physics D: Applied Physics **40**(5): 1313-1319.
- Furlani, E. P. and K. C. Ng (2006b). "Analytical model of magnetic nanoparticle transport and capture in the microvasculature." <u>Physical</u> <u>Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics</u> **73**(6): 0619191-10.
- Furlani, E. P., Y. Sahoo, et al. (2007c). "A model for predicting magnetic particle capture in a microfluidic bioseparator." <u>Biomedical microdevices</u> **9**(4): 451-463.
- Grimm, J. and D. A. Scheinberg (2011). "Will Nanotechnology Influence Targeted Cancer Therapy?" <u>Seminars in Radiation Oncology</u> **21**(2): 80-87.
- Grobmyer, S. R., D. L. Morse, et al. (2011). "The promise of nanotechnology for solving clinical problems in breast cancer." <u>Journal of Surgical</u> <u>Oncology</u> **103**(4): 317-325.
- Gupta, A. K. and M. Gupta (2005). "Synthesis and surface engineering of iron oxide nanoparticles for biomedical applications." <u>Biomaterials</u> **26**(18): 3995-4021.
- Habibi, M. R. and M. Ghasemi (2011). "Numerical study of magnetic nanoparticles concentration in biofluid (blood) under influence of high gradient magnetic field." <u>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</u> 323(1): 32-38.
- Hallmark, B., N. Darton, et al. (2010). "Magnetic field strength requirements to capture superparamagnetic nanoparticles within capillary flow." <u>Journal</u> of Nanoparticle Research **12**: 2951-2965.
- Haverkort, J. W., S. KenjereÅ<sub>i</sub>, et al. (2009a). "Computational simulations of magnetic particle capture in arterial flows." <u>Annals of Biomedical</u> <u>Engineering</u> **37**(12): 2436-2448.
- Haverkort, J. W. and S. Kenjeres (2009). Optimizing drug delivery using nonuniform magnetic fields: a numerical study. <u>4th European Conference</u> <u>of the International Federation for Medical and Biological Engineering</u>, Springer Berlin Heidelberg. **22**: 2623-2627.
- Haverkort, J. W., S. Kenjeres, et al. (2009c). "Magnetic particle motion in a Poiseuille flow." Phys. Rev. E **80**(1).
- Hinds, W. (1999). <u>Aerosol Technology: Properties, behavior, and</u> <u>measurement of aerosol particles</u>. USA, John Wiley and Sons, Inc.
- Hournkumnuard, K. and C. Chantrapornchai (2011). "Parallel simulation of concentration dynamics of nano-particles in High Gradient Magnetic Separation." <u>Simulation Modelling Practice and Theory</u> **19**(2): 847-871.
- Iancu, C., I. R. Ilie, et al. (2009). "Applications of nanomaterials in cell stem therapies and the onset of nanomedicine." <u>Particulate Science and</u> <u>Technology</u> 27(6): 562-574.
- Jones, T. (1995). <u>Electromechanics of particles</u>. Cambridge, UK, Cambridge University Press.

- Kenjeres, S. and D. C. Cohen Stuart (2010). Computational Simulations of Magnetic Particle Capture in Simplified and Realistic Arterial Flows: Towards Optimized Magnetic Drug Targeting. <u>World Congress on</u> <u>Medical Physics and Biomedical Engineering, September 7 - 12, 2009,</u> <u>Munich, Germany</u>. R. Magjarevic, J. H. Nagel, O. D\$Ã*f*¶\$ssel and W. C. Schlegel, Springer Berlin Heidelberg. **25/4**: 1006-1009.
- Khashan, S. A., E. Elnajjar, et al. (2011a). "Numerical simulation of the continuous biomagnetic separation in a two-dimensional channel." International Journal of Multiphase Flow In Press, Corrected Proof.
- Khashan, S. A., E. Elnajjar, et al. (2011b). "CFD simulation of the magnetophoretic separation in a microchannel." <u>Journal of Magnetism</u> and Magnetic Materials **In Press, Corrected Proof**.
- Kumar, A., P. K. Jena, et al. (2010). "Multifunctional magnetic nanoparticles for targeted delivery." <u>Nanomedicine: Nanotechnology, Biology, and</u> <u>Medicine</u> **6**(1): e64-e69.
- Lanza, G. M., P. M. Winter, et al. (2004). "Magnetic resonance molecular imaging with nanoparticles." <u>Journal of Nuclear Cardiology</u> **11**(6): 733-743.
- Lu, A. H., E. L. Salabas, et al. (2007). "Magnetic nanoparticles: Synthesis, protection, functionalization, and application." <u>Angewandte Chemie</u> -<u>International Edition</u> **46**(8): 1222-1244.
- Murariu, V., O. Rotariu, et al. (2001). "Modelling of magnetodensimetric separation in two high gradient magnetic separation axial cells." <u>Powder Technology</u> **116**(1): 97-102.
- Nahrendorf, M., H. Zhang, et al. (2008). "Nanoparticle PET-CT imaging of macrophages in inflammatory atherosclerosis." <u>Circulation</u> **117**(3): 379-387.
- Neofytou, P. (2005). "A 3rd order upwind finite volume method for generalised Newtonian fluid flows." <u>Advances in Engineering Software</u> **36**(10): 664-680.
- Neofytou, P. and S. Tsangaris (2006). "Flow effects of blood constitutive equations in 3D models of vascular anomalies." <u>International Journal for Numerical Methods in Fluids</u> **51**(5): 489-510.
- Neuberger, T., B. Schoepf, et al. (2005). "Superparamagnetic nanoparticles for biomedical applications: Possibilities and limitations of a new drug delivery system." <u>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</u> **293**(1): 483-496.
- Pankhurst, Q. A., J. Connolly, et al. (2003). "Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine." <u>Journal of Physics D: Applied Physics</u> 36(13): R167-R181.
- Patankar, S. V. (1980). "Numerical heat transfer and fluid flow."
- Pilou, M. (2012). Investigation of interactions between particles and flowing biofluids. Athens.
- Pilou, M., S. Tsangaris, et al. (2011). "Inertial particle deposition in a 90 laminar flow bend: An eulerian fluid particle approach." <u>Aerosol</u> <u>Science and Technology</u> **45**(11): 1376-1387.
- Prijic, S. and G. Sersa (2011). "Magnetic nanoparticles as targeted delivery systems in oncology." <u>Radiology and Oncology</u> **45**(1): 1-16.

- Rezlescu, N., V. Murariu, et al. (1995). "Capture modeling for an axial high gradient magnetic separation filter with a bounded flow field." <u>Powder</u> <u>Technology</u> **83**(3): 259-264.
- Rotariu, O., I. D. Ogden, et al. (2005b). "An immunomagnetic separator for concentration of pathogenic micro-organisms from large volume samples." <u>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</u> 293(1): 589-596.
- Rotariu, O., I. D. Ogden, et al. (2005). "Multiple sample flow through immunomagnetic separator for concentrating pathogenic bacteria." <u>Physics in Medicine and Biology</u> **50**(12): 2967-2977.
- Rotariu, O. and N. J. C. Strachan (2005a). "Modelling magnetic carrier particle targeting in the tumor microvasculature for cancer treatment." <u>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</u> **293**(1): 639-646.
- Seinfeld, J. and S. Pandis (1998). <u>Atmospheric chemistry and physics: From</u> <u>air polution to climate</u>
- change. USA, John Wiley and Sons, Inc.
- Sharma, P., S. Brown, et al. (2006). "Nanoparticles for bioimaging." <u>Advances</u> in <u>Colloid and Interface Science</u> **123-126**(SPEC. ISS.): 471-485.
- Sharma, R. and S. Kwon (2007). "New applications of nanoparticles in cardiovascular imaging." <u>Journal of Experimental Nanoscience</u> **2**(1-2): 115-126.
- Slevin, M., L. Badimon, et al. (2010). "Combining nanotechnology with current biomedical knowledge for the vascular imaging and treatment of atherosclerosis." <u>Molecular BioSystems</u> **6**(3): 444-450.
- Stone, H. (1968). "Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations." <u>SIAM Journal of Numerical Analysis</u> **5**: 530-558.
- Thorek, D. L. J., A. K. Chen, et al. (2006). "Superparamagnetic iron oxide nanoparticle probes for molecular imaging." <u>Annals of Biomedical</u> <u>Engineering</u> **34**(1): 23-38.
- Yallapu, M. M., S. F. Othman, et al. (2011). "Multi-functional magnetic nanoparticles for magnetic resonance imaging and cancer therapy." <u>Biomaterials</u> **32**(7): 1890-1905.
- Zborowski, M., L. R. Moore, et al. (2002). "Separations based on magnetophoretic mobility." <u>Separation Science and Technology</u> **37**(16): 3611-3633.
- Zborowski, M., L. Sun, et al. (1999). "Continuous cell separation using novel magnetic quadrupole flow sorter." <u>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</u> **194**(1): 224-230.