

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΡΕΥΣΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ & ΣΤΡΟΒΙΛΟΜΗΧΑΝΩΝ ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΜΙΚΡΟΦΥΣΑΛΙΔΑΣ ΜΕ ΕΛΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΣΤΡΩΣΗ ΜΕ ΣΤΕΡΕΟ ΤΟΙΧΩΜΑ ΜΕΣΑ ΣΕ ΙΞΩΔΗ ΡΟΗ

Μαρία Βλαχομήτρου & Νίκος Πελεκάσης



10° ΠΑΝΕΛΛΗΝΙΟ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟ ΣΥΝΕΔΡΙΟ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ, ΠΑΤΡΑ, 4-6 ΙΟΥΝΙΟΥ, 2015

ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Οι μικροφυσαλίδες τύπου contrast agent έχουν αρκετές τεχνολογικές εφαρμογές όπως:

- Η στοχευμένη μεταφορά και απελευθέρωση φαρμάκου η φυσαλίδα μέσω κατάλληλης ακουστικής διαταραχής οδηγείται στην πάσχουσα περιοχή και διαρρηγνύεται εκλύοντας το φάρμακο (Ferrera et al., 2007)
- Η ιατρική απεικόνιση ζωτικών οργάνων χρησιμοποιούνται μικροφυσαλίδες που περιέχουν αέριο και οι οποίες μπορούν να ενισχύσουν το σήμα των υπερήχων και να παράγουν εικόνα υψηλής ποιότητας (Kaufmann et al., 2007)

ΣΚΟΠΟΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

- Να μελετηθεί η απόκριση ελαστικών μικροφυσαλίδων σε βηματικές και ακουστικές διαταραχές όταν λαμβάνεται υπόψη το ιξώδες του ρευστού που τις περιβάλλει.
- Να προσδιοριστεί το πώς επηρεάζει η παρουσία του τοιχώματος την συμπεριφορά των φυσαλίδων τύπου contrast agent.
- Να αναπτυχθεί κατάλληλη αριθμητική μεθοδολογία για την προσομοίωση του συγκεκριμένου προβλήματος.

<u>ΚΑΤΑΣΤΡΩΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ</u>



10° ΠΕΣΧΜ, ΠΑΤΡΑ, 4-6 ΙΟΥΝΙΟΥ, 2015

Ισοζύγιο δυνάμεων στην μεμβράνη:

$$\left(-P\underline{I}_{=}+\frac{1}{\operatorname{Re}}\underline{\ddagger}_{l}\right)\cdot\overline{n}+P_{G}\cdot\overline{n}=\frac{(\overline{\nabla}_{s}\cdot\overline{n})\overline{n}}{We}+\overline{\Delta F}=\frac{2k_{m}}{We}\overline{n}-\overline{\nabla}_{s}\cdot\underline{\ddagger}_{=el}=-\overline{\nabla}_{s}\cdot\left(\underline{\ddagger}_{=el}+\frac{1}{We}\underline{I}\right)$$

όπου
$$W e = ... \check{S}_{f}^{2} R_{0}^{3} / \dagger$$

- n : κάθετο μοναδιαίο διάνυσμα προς εξωτερικό φυσαλίδας
- P_G : πίεση αερίου
- $\overline{
 abla}_s, k_m$: η επιφανειακή κλίση και η μέση καμπυλότητα της διεπιφάνειας αντίστοιχα
- $-ec{
 abla}_s\cdot \ddagger_{el}$: η δύναμη λόγω των ιξωδοελαστικών ιδιοτήτων της μεμβράνης

$$-\overline{\nabla}_{s} \cdot \underbrace{\ddagger_{el}}{=} \left[k_{s} \ddagger_{s} + k_{w} \ddagger_{w} - \frac{1}{r_{0}} \frac{\partial}{\partial S} (r_{0}q) \right] \overline{n} - \left[\frac{\partial \ddagger_{s}}{\partial S} + \frac{1}{r_{0}} \frac{\partial r_{0}}{\partial S} (\ddagger_{s} - \ddagger_{w}) + k_{s}q \right] \overline{e}_{s}$$

- - es : εφαπτομενικό μοναδιαίο διάνυσμα

q : η εγκάρσια διατμητική τάση που προκύπτει από το ισοζύγιο ροπών στην μεμβράνη

$$q = \frac{1}{r_0} \frac{\partial r_0}{\partial S} \left| \frac{\partial}{\partial r_0} (r_0 m_s) - m_w \right|$$
όπου m_s, m_w οι κυρίες ροπές κάμψης

Η ιξοδοελαστική συμπεριφορά της μεμβράνης περιγράφεται με τον Mooney-Rivlin καταστατικό νομο

Αδιαβατική μεταβολή πίεσης φυσαλίδας:

$$P_{G}(t=0)V_{G}^{x}(t=0) = P_{G}(t)V_{G}^{x}(t)$$
όπου $P_{G}(t=0) = P_{st} + \frac{2}{We}$

<u>ΕΠΙΛΥΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ SPINE</u>

1. ΦΥΣΑΛΙΔΑ ΣΕ ΜΗ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΕΝΗ ΡΟΗ

<u>Αλλαγή μεταβλητής</u>: (r, θ) — (η, ξ)



•
$$f_2(0,t) = 0$$
 • $f_2(1,t) = f$

2. ΦΥΣΑΛΙΔΑ ΣΕ ΡΟΗ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΕΝΗ ΑΠΟ ΤΟΙΧΩΜΑ

<u>Αλλαγή μεταβλητής</u>: (r, z) \longrightarrow (η, ξ)



10° ΠΕΣΧΜ, ΠΑΤΡΑ, 4-6 ΙΟΥΝΙΟΥ, 2015

Αριθμητική επίλυση με Πεπερασμένα Στοιχεία με <u>διτετραγωνικές και διγραμμικές λαγκρανζιανές</u> συναρτήσεις βάσης για ταχύτητα και πίεση αντίστοιχα και μονοδιάστατες κυβικές splines για σχήμα διεπιφάνειας

•
$$\iint B_{l,i} \overline{\nabla} \cdot \overline{u} dV = 0$$

•
$$\iiint B_i \frac{\partial u}{\partial t} \cdot \bar{e}_k dV + \iiint B_i (\bar{u} \cdot \bar{\nabla}) \bar{u} \cdot \bar{e}_k dV - \iiint p \bar{\nabla} (B_i \bar{e}_k) dV + \frac{1}{\text{Re}} \iiint \bar{\bar{t}} : \bar{\nabla} (B_i \bar{e}_k) dV + \int B_i \bar{N} \cdot (p \bar{\bar{I}} - \frac{1}{\text{Re}} \bar{\bar{t}} \cdot \bar{e}_k) dA = 0$$

ó που $\bar{e}_k = (\bar{e}_r, \bar{e}_s)$ **ή** $\bar{e}_k = (\bar{e}_r, \bar{e}_z)$

Κινηματική συνθήκη ως essential οριακές για ταχύτητες και ισοζύγιο δυνάμεων για υπολογισμό σχήματος διεπιφάνειας (λόγω παρουσίας 4^{ης} μερικής παραγώγου στο ισοζύγιο δυνάμεων)

$$\bullet \int b_i \left(-p\underline{I} + \frac{1}{\operatorname{Re}} \ddagger \right) \cdot \overline{n} \cdot \overline{e}_m ds + \int b_i P_G \cdot \overline{n} \cdot \overline{e}_m ds - \int b_i \frac{2k_m}{We} \overline{n} \cdot \overline{e}_m ds + \int b_i \overline{\Delta F} \cdot \overline{e}_m ds = 0$$

όπου $e_m = (n, e_s)$ και b_i οι spline συναρτήσεις

- Χρονική ολοκλήρωση με πλήρως άρρητο σχήμα
- Η μη γραμμικότητα του προβλήματος αντιμετωπίζεται με Newton-Raphson
- Για τη μείωση του υπολογιστικού χρόνου η ιακωβιανή του συστήματος δεν κατασκευάζεται σε κάθε χρονικό βήμα και η λύση του συστήματος γίνεται επαναληπτικά με τη μέθοδο GMRES

ΕΠΙΛΥΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΕΛΛΕΙΠΤΙΚΗΣ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ

(Christodoulou & Scriven, 1992; Tsiveriotis & Brown, 1992; Notz & Basaran, 2004)

<u>ΑΛΛΑΓΗ ΜΕΤΑΒΛΗΤΗΣ</u>: (r, z, t) ή (r, θ, t) $\xrightarrow{|J|}$ (η, ξ, t)

(Dimakopoulos & Tsamopoulos, 2003a)

$$\overline{\nabla} \cdot \left\{ \left(\mathsf{V}_1 S + (1 - \mathsf{V}_1) \right) \overline{\nabla} < \right\} = 0$$
 (n- καμπύλες)

 $\overline{\nabla} \cdot \overline{\nabla} n = 0$ (ξ-καμπύλες)

$$\iint \left(\varepsilon_1 S + (1 - \varepsilon_1) \right) \overline{\nabla} \xi \cdot \overline{\nabla} B_i d\Omega$$
$$\iint \overline{\nabla} n \cdot \overline{\nabla} B_i d\Omega = 0$$



- Το S εισάγεται ώστε οι n-καμπύλες να είναι σχεδόν κάθετες στην διεπιφάνεια
- Το ε₁ είναι εμπειρική παράμετρος μεταξύ 0 και 1 που καθορίζει την ομαλότητα σε σχέση με την ορθογωνιότητα του πλέγματος.

FEM

- Σε όλα τα σύνορα εκτός από τη διεπιφάνεια εφαρμόζουμε συνθήκες καθετότητας μη γράφοντας τους επικαμπύλιους όρους που προκύπτουν από το θεώρημα απόκλισης
- Για τον έλεγχο της κατανομής των κόμβων χρησιμοποιείται η μέθοδος της ποινής

Όταν επιλύεται η ροή γύρω από φυσαλίδα παρουσία τοιχώματος η μέθοδος ποινής εφαρμόζεται και στις n-καμπύλες που ξεκινάνε από τους πόλους της φυσαλίδας (Chatzidai et al., 2009)

ΦΥΣΑΛΙΔΑ ΜΕ ΕΛΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΣΤΡΩΣΗ (contrast agent)

- Στη ροή χρησιμοποιούνται διτετραγωνικές και διγραμμικές λαγκρανζιανές συναρτήσεις βάσης για την ταχύτητα και την πίεση αντίστοιχα.
- Λόγω της ύπαρξης 4^{ης} μερικής παραγώγου στο ισοζύγιο δυνάμεων στην διεπιφάνεια, <u>για την</u> κατασκευή του πλέγματος χρησιμοποιείται ένα υβριδικό σχήμα που συνδυάζει τις διτετραγωνικές <u>λαγκρανζιανές με τις μονοδιάστατες κυβικές συναρτήσεις splines</u>. Δηλαδή, τα σημεία της διεπιφάνειας περιγράφονται με συναρτήσεις splines, ενώ όλα τα υπόλοιπα με λαγκρανζιανές συναρτήσεις.
- Σε κάθε χρονικό βήμα επιλύονται μαζί η ροή και το σχήμα της διεπιφάνειας. Η κινηματική συνθήκη χρησιμοποιείται ως essential συνθήκη για την ταχύτητα, ενώ από το ισοζύγιο δυνάμεων προκύπτει το σχήμα της διεπιφάνειας
- Το σχήμα της διεπιφάνειας που προκύπτει χρησιμοποιείται ως essential συνθήκη για την επίλυση των ελλειπτικών εξισώσεων του πλέγματος.
- Η μέθοδος ποινής δεν χρειάζεται να εφαρμοστεί στην διεπιφάνεια αλλά μόνο στις n-καμπύλες που ξεκινάνε από τους πόλους της φυσαλίδας (στην περίπτωση παρουσίας τοιχώματος).
- Σε όλα τα σύνορα εκτός από τη διεπιφάνεια εφαρμόζουμε συνθήκες καθετότητας μη γράφοντας τους επικαμπύλιους όρους που προκύπτουν από το θεώρημα απόκλισης

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΒΗΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΤΑΡΑΧΗ

Για βηματική διαταραχή οι ελαστικές φυσαλίδες, σύμφωνα με τη στατική ανάλυση, μπορεί να καταλήξουν σε μόνιμη κατάσταση μη σφαιρικού σχήματος.



(Knoche & Kierfeld, 2011)



(Lytra & Pelekasis, 2014)

Μας ενδιαφέρει να διερευνηθεί δυναμικά αν αυτό είναι εφικτό και να προσδιοριστεί αν αυξάνοντας την εξωτερική διαταραχή σχηματίζεται jet (όπως στις ελεύθερες φυσαλίδες) ή αν η φυσαλίδα αντιδρά με διαφορετικό τρόπο.

Επίσης, είναι σημαντικό να μελετηθεί αν η συμπεριφορά της φυσαλίδας αλλάζει παρουσία τοιχώματος

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΒΗΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΤΑΡΑΧΗ ΣΕ ΜΗ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΕΝΗ ΡΟΗ

 $R'_{0} = 3.6 \mu m, \ \mu_{s} = 20 P a \cdot s, \ thickness = 1 nm, \ G_{s} = 80 \text{MPa}, \ k_{b} = 3 \cdot 10^{-14} N \cdot m$ $\rho = 998 kg / m^{3}, \ \mu = 10^{-3} P a \cdot s, \ \sigma = 0.051 N / m, \ \gamma = 1.07$ <u>Ρευστό:</u> Νερό ($\mu_l = 10^{-3} Pa \cdot s$)

Εξωτερική διαταραχή: $P_{\infty} = P_{st} [1+v], \quad v = 1.65-3$



- Η φυσαλίδα εκτελεί λίγες ταλαντώσεις όγκου και καταλήγει γρήγορα σε συμπιεσμένο σφαιρικό σχήμα.
- Για πλάτη διαταραχής ε >1.65 παρατηρείται στατικός λυγισμός (ε_{cr}=1.55)
- Τελικά, για ε=1.65-3 καταλήγουμε σε νέα μόνιμη κατάσταση μικρότερης ενέργειας από την ενδιάμεση σφαιρική
- Αν αγνοηθεί το ιξώδες του υγρού, η επιφανειακή τάση ή επιβληθεί ακινησία της φυσαλίδας δεν προκύπτει μόνιμη κατάσταση, αλλά η ιδιομορφή Ρ4 αυξάνεται διαρκώς και η φυσαλίδα τελικά καταρρέει



- Μειώνοντας το ιξώδες του υγρού που περιβάλει τη φυσαλίδα καταλήγουμε στην ίδια μόνιμη κατάσταση
- Μειώνοντας το ιξώδες του υγρού μειώνεται ελαφρώς η χρονική διάρκεια της ενδιάμεσης σφαιρικής μόνιμης κατάστασης και οι ιδιομορφές σχήματος παρουσιάζουν περισσότερες ταλαντώσεις μέχρι να καταλήξουν σε σταθερή τιμή



- Η μέθοδος spine αδυνατεί να περιγράψει τη συμπεριφορα της φυσαλίδας ικανοποιητικά μέχρι τέλους, ενώ με την ελλειπτική μέθοδο κατασκευής πλεγμάτος μπορούμε να αποτυπώσουμε την παραμόρφωση της φυσαλίδας σε όλα τα στάδια
- Η φυσαλίδα καταλήγει πάλι σε μόνιμη κατάσταση, παρόμοιου σχήματος με αυτό που παρατηρείται απουσία τοιχώματος αλλά αρκετά πιο συμπιεσμένο.
- Το τοίχωμα επιταχύνει τη εμφάνιση των ιδιομορφών σχήματος και μεταβάλει λίγο το τελικό σχήμα ισορροπίας-Λόγω του ιξώδους η μετακίνηση προς το τοίχωμα είναι ελάχιστη



Μειώνοντας την απόσταση της φυσαλίδας από το τοίχωμα ή το ιξώδες του ρευστού που την περιβάλλει καταλήγουμε στην ίδια μόνιμη κατάσταση

Επιβολή εντονότερης διαταραχής: $P_{\infty}^{'} = P_{st}^{'} [1+v], v = 3$











- Η φυσαλίδα καταλήγει πάλι σε μόνιμη κατάσταση αλλά διαφορετικού σχήματος σε σχέση με αυτό που παρατηρείται απουσία τοιχώματος
- Ο πάνω πόλος της φυσαλίδας κινείται πολύ γρήγορα προς τα μέσα, στη συνέχεια επιβραδύνεται και ο κάτω πόλος αρχίζει να κινειται προς τα πάνω μέχρι τη συνένωση των δύο πόλων

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΑΚΟΥΣΤΙΚΗ ΔΙΑΤΑΡΑΧΗ

Για ακουστική διαταραχή η συμπεριφορά των ελαστικών φυσαλίδων απουσία τοιχώματος περιγράφεται με διαγράμματα φάσεων



- Μας ενδιαφέρει να διερευνηθεί δυναμικά το κατά πόσο η παραπάνω συμπεριφορά των ελαστικών φυσαλίδων επηρεάζεται από το ιξώδες της ροής και από την παρουσία του τοιχώματος
- Επίσης, είναι σημαντικό να προσδιοριστεί ο τρόπος κατάρρευσης της φυσαλίδας παρουσία τοιχώματος
- Τέλος, είναι σημαντικό να μελετηθεί η συμπεριφορά της φυσαλίδας πολύ κοντά στο τοίχωμα όπου είναι πιθανό να παρατηρηθεί το φαινόμενο του microstreaming (*Marmottant & Hilgenfeldt, 2003*)



- Όταν το ιξώδες της ροής λαμβάνεται υπόψη για πλάτος διαταραχής ε=5.1 παρατηρούνται ταλαντώσεις όγκου και όχι σχήματος
- Για πλάτος διαταραχής ε=7 καταγράφονται σταθερές ταλαντώσεις σχήματος (P₄ επικρατεί και P₆, P₈ ακλουθούν) σε <u>υποαρμονικό συντονισμο (συχνότητα των ταλαντώσεων του όγκου</u> διπλάσια από συχνότητα P₄)
- Μέγιστο πλάτος ιδιομορφών όταν η ακτίνα αποκτά ελάχιστη τιμή κατά την συμπίεση
- > Μεταβολή ακτίνας κατά τη συμπίεση λίγο μεγαλύτερη σε σχέση με τη διόγκωση.



- Η φυσαλίδα ταλαντώνεται με την εξωτερική συχνότητα και κινείται προς το τοίχωμα κατά την συμπίεση.
- Το σχήμα κατά τη συμπίεση είναι επιμηκυμένο κατά μήκος του άξονα συμμετρίας, πιο στενό στον κάτω πόλο και πιο σφαιρικό στον πάνω. Όταν πλησιάζει πολύ κοντά στο τοίχωμα, το ιξώδες του ρευστού αντιστέκεται στην κίνηση. Το σχήμα γίνεται πλατύ και ευθύγραμμο στον κάτω πόλο.
- Παρατηρείται τοπική αύξηση της πίεσης στον κάτω πόλο.



- Μειώνοντας το ιξώδες του ρευστού η φυσαλίδα εκτελεί πιο έντονες ταλαντώσεις σχήματος και συμπεριφέρεται διαφορετικά όταν πλησιάζει κοντά στο τοίχωμα δεν παρατηρείται πλατύ και ευθύγραμμο τμήμα στον κάτω πόλο.
- Και στις δυο περιπτώσεις όταν η φυσαλίδα πλησιάζει κοντά στο τοίχωμα παρατηρείται άπωση των n-γραμμών μακριά από το τοίχωμα – πρέπει να βελτιωθεί η κατασκευή του πλέγματος



Όταν η φυσαλίδα πλησιάζει κοντά στο τοίχωμα θα πρέπει να για την κατασκευή του πλέγματος το υπολογιστικό πεδίο να χωριστεί σε δυο επιμέρους τμήματα.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

- Αναπτύχθηκε αριθμητική μεθοδολογία για την προσομοίωση της συμπεριφοράς ελαστικής φυσαλίδας μέσα σε ιξώδη ροή χρησιμοποιώντας ένα υβριδικό superparametric σχήμα που συνδυάζει τη χρήση διδιάστατων λαγκρανζιανών συναρτήσεων για την προσομοίωση του υγρού και μονοδιάστατων κυβικών συναρτήσεων splines για την περιγραφή του σχήματος της διεπιφάνειας.
- Η κατασκευή του πλέγματος πραγματοποιήθηκε με τη μέθοδο spine και με ελλειπτική μεθοδολογία. Η μέθοδος spine, ιδιαίτερα κατά την αλληλεπίδραση φυσαλίδας με τοίχωμα, αδυνατεί να περιγράψει τις μεγάλες παραμορφώσεις της διεπιφάνειας, γεγονός που αντιμετωπίζεται με την ελλειπτική κατασκευή του πλέγματος.
- Για προσομοιώσεις κοντά στο τοίχωμα η ελλειπτική κατασκευή του πλέγματος πρέπει να υλοποιηθεί χωρίζοντας το πεδίο σε δυο επιμέρους τμήματα.
- Για φυσαλίδα τύπου contrast agent και για βηματική διαταραχή είναι πιθανή μόνιμη κατάσταση μη σφαιρικού σχήματος. Αν αγνοηθεί το ιξώδες του υγρού, η επιφανειακή τάση ή επιβληθεί ακινησία της φυσαλίδας η μόνιμη κατάσταση δεν είναι εφικτή και παρατηρείται κατάρρευση της φυσαλίδας.
- Η μόνιμη κατάσταση εξακολουθεί να υφίσταται παρουσία τοιχώματος. Το τοίχωμα επιταχύνει την εμφάνιση των ιδιομορφών σχήματος και μεταβάλει το τελικό σχήμα της ισορροπίας (φυσαλίδα μικρότερου όγκου).

- Για βηματική διαταραχή και για τα πλάτη διαταραχών που χρησιμοποιήθηκαν δεν καταγράφηκε κατάρρευση φυσαλίδας με δημιουργία jet.
- Για ακουστική διαταραχή η φυσαλίδα ταλαντώνεται με την εξωτερική συχνότητα και κινείται προς το τοίχωμα κατά την συμπίεση. Το ιξώδες του ρευστού μεταβάλλει το κρίσιμο πλάτος διαταραχής για εμφάνιση δυναμικού λυγισμού.
- Όταν η φυσαλίδα πλησιάζει πολύ κοντά στο τοίχωμα, το ιξώδες του ρευστού αντιστέκεται στην κίνηση, το σχήμα γίνεται πλατύ και ευθύγραμμο στον κάτω πόλο η πίεση αυξάνεται τοπικά στο σημείο αυτό.





Η εργασία συγχρηματοδοτήθηκε από τη ΓΓΕΤ και την Ευρωπαϊκή Ένωση στα

πλαίσια του προγράμματος ΑΡΙΣΤΕΙΑ Ι

10° ΠΕΣΧΜ, ΠΑΤΡΑ, 4-6 ΙΟΥΝΙΟΥ, 2015