

Πάτρα, . . ./. . ./ . . .

Αρ. Πρωτ.: . . . . . .

## Προς: Επιτροπή Ερευνών του Ειδικού Λογαριασμού του Τ.Ε.Ι. Πάτρας

**Παραδοτέα Έργου**

|  |  |
| --- | --- |
| Επιστημονικός υπεύθυνος:  | **ΚΑΜΒΥΣΑΣ ΓΡΗΓΟΡΙΟΣ** |
| Τίτλος έργου:  | **ΑΡΧΙΜΗΔΗΣ ΙΙΙ: ΕΝΙΣΧΥΣΗ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΩΝ ΟΜΑΔΩΝ ΣΤΑ ΤΕΙ - ΥΠΟΕΡΓΟ 8 «ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΡΟΪΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ ΒΙΟΛΟΓΙΚΩΝ ΥΓΡΩΝ ΓΙΑ ΘΕΡΑΠΕΥΤΙΚΟ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟ ΣΕ ΚΛΙΝΙΚΑ ΣΗΜΑΝΤΙΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ»** |
| Κωδικός έργου: | 10.74.11.02 - 061 |

*Παραδοτέο Π.Ε.4, Υπολογιστική Ρευστοδυναμική (CFD) με βελτιωμένες μεθόδους*

Στα πλαίσια του Π.Ε.4 Υπολογιστική Ρευστοδυναμική (CFD) με βελτιωμένες μεθόδους:

Σύνοψη: Έγινε η ανάπτυξη μεθόδων επίλυσης για απλεγματικές μεθόδους, για μεθόδους δικτύου Boltzmann, και για συνήθεις μεθόδους.

Περιγραφή Εργασιών: Στο πρώτο μέρος επιλύθηκε η εξίσωση της ενέργειας χωρίς την παρουσία ταχυτήτων, όπου σταθερές θερμοκρασίες επιβάλλονται στα απέναντι τοιχώματα του χωρίου αρτηρίας, ενώ τα άλλα δύο θεωρούνται θερμικά μονωμένα. Σε δεύτερο μέρος επιλύθηκαν οι εξισώσεις Navier-Stokes, θεωρώντας περιοδικότητα στην ροή κατά την διεύθυνση ροής, και θέτοντας τα άνω και κάτω όρια του πεδίου τοιχώματα μηδενικής ταχύτητας. Οι ταχύτητες που υπολογίζονται, χρησιμοποιούνται στη συνέχεια για την εύρεση του θερμοκρασιακού προφίλ από την εξίσωση της ενέργειας, με τις παραπάνω συνοριακές συνθήκες. Στα προβλήματα ροής, η οδηγούσα δύναμη ήταν εξωτερικά επιβαλλόμενη, και το αντιπροσωπευτικό πεδίο περιοδικό, όπως και η ροή. Η ροή θεωρήθηκε ασυμπίεστη και έγινε διερεύνηση των αποτελεσμάτων σε ένα εύρος των αριθμών Reynolds και Prandtl.

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η υπολογιστική ρευστοδυναμική (CFD) αποτελεί ένα από τα πλέον ενδιαφέροντα και σύγχρονα επιστημονικά αντικείμενα στη μοντελοποίηση και προσομοίωση της ροής βιολογικών υγρών (αίματος ή ούρων) σε αγγεία και αρτηρίες και την εκτίμηση των ρευστοδυναμικών παραμέτρων αυτής. Δημοσιευμένες μελέτες σε πειραματικά μοντέλα και υπολογιστικές τεχνικές σε ομοιώματα αρτηριών και πραγματικές, στενωμένες αρτηρίες καταδεικνύουν ότι οι φυσικοχημικές ιδιότητες που διέπουν την τοπική μεταφορά μάζας και την ανάπτυξη διατμητικών τάσεων στην επιφάνεια συνάφειας βιολογικού υγρού (αίματος ή ούρων) και τοιχώματος αγγείου αποτελούν σημαντικές αιμοδυναμικές παραμέτρους που επηρεάζουν τόσο την παθογένεση όσο και την εξέλιξη της αθηρωμάτωσης/στένωσης. Επίσης τονίζουν ότι οι τοπικές αιμοδυναμικές παράμετροι, που είναι ειδικές για κάθε ασθενή, θα πρέπει να χαρακτηρίζονται με ακρίβεια, ιδιαίτερα πριν από τη λήψη της ιατρικής απόφασης για θεραπευτική παρέμβαση. Προς αυτήν την κατεύθυνση είναι προφανές ότι η εφαρμογή της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής θα πρέπει να υλοποιηθεί σε δεδομένα του ίδιου του ασθενούς και πιο συγκεκριμένα πάνω σε πραγματικές αγγειακές δομές και αθηρώματα Το παρόν έργο έχει εστιάσει στην εφαρμογή των CFD αλγορίθμων σε στενωμένες νεφρικές αρτηρίες.

Στο παρόν έργο, η απλεγματική μέθοδος της *τοπικής ταύτισης* χρησιμοποιείται για την αριθμητική επίλυση των τρισδιάστατων εξισώσεων παροδικής, ασυμπίεστης, και στρωτής ροής αιμοδυναμικού ρευστού σε στενωμένες αρτηρίες. Οι ισχύουσες εξισώσεις εκφράζουν τη διατήρηση της μάζας και της ορμής, γραμμένες στη μορφή ταχύτητας-στροβιλότητας. Οι συνιστώσες της ταχύτητας προσδιορίζονται επιλύοντας ελλειπτικές εξισώσεις τύπου Poisson, ενώ η μέθοδος *διόρθωσης της ταχύτητας* εφαρμόζεται στις εξισώσεις ισοζυγίου ορμής ώστε να εξασφαλίζεται η συνέχεια της μάζας. Η μέθοδος προσέγγισης Μετακυλούμενων Ελαχίστων Τετραγώνων (Moving Least Squares, MLS) χρησιμοποιείται για την κατασκευή των συναρτήσεων σχήματος και τις παραγώγους των άγνωστων μεταβλητών πεδίου. Θεωρούνται τόσο 2D όσο και 3D παραδείγματα ροής. Η ευστάθεια και η ακρίβεια του προτεινόμενου συστήματος απεικονίζεται συγκριτικά με συμβατικές μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων ή πεπερασμένων διαφορών. Για τους υπολογισμούς με μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων, όπου απαιτείται, έχει χρησιμοποιηθεί το λογισμικό ANSYS CFX. Για υπολογισμούς ροής χρησιμοποιήθηκε εναλλακτικά για σύγκριση και η μέθοδος Lattice-Boltzmann προτύπου BGK μονής χαλάρωσης.

Το φυσικό πρόβλημα μοντελοποιήθηκε λαμβάνοντας υπόψη σημαντικές αιμοδυναμικές παραμέτρους σχετικά με τη τοπική μεταφορά μάζας και την ανάπτυξη διατμητικών τάσεων στην επαφή βιολογικού υγρού και τοιχώματος αγγείου, οι οποίες αναλύθηκαν τόσο με απλεγματικές όσο και με τυπικές CFD μεθόδους FEM. Η σύγκριση των αποτελεσμάτων ανέδειξε την ακρίβεια χρήσης αυτών των ταχύτερων -σε σχέση με τις συμβατικές- καινοτόμων υπολογιστικών μεθόδων, όπως και την αποτελεσματικότερη χρήση τους για την υπολογιστική διερεύνηση σε εύρος συνθηκών που σχετίζονται τόσο με την παθογένεση όσο και την εξέλιξη της αθηρωμάτωσης/στένωσης.

### ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ

Για δεκαετίες, οι μέθοδοι των Πεπερασμένων Διαφορών, των Πεπερασμένων Όγκων και των Πεπερασμένων Στοιχείων έχουν επικρατήσει ως τα αριθμητικά σχήματα τα οποία χρησιμοποιούνται ευρέως στην επίλυση πλήθους προβλημάτων, τα οποία καλύπτουν ευρεία περιοχή επιστημονικών και τεχνολογικών εφαρμογών. Μια συνήθης δυσκολία των μεθόδων αυτών προέρχεται από το χρόνο και την προσπάθεια που απαιτούνται για την διακριτοποίηση και αρίθμηση των στοιχείων του υπολογιστικού χώρου, δηλαδή αυτού που ονομάζουμε δημιουργία πλέγματος. Στο στάδιο αυτό δαπανάται συνήθως η περισσότερη προσπάθεια, ιδιαιτέρως όταν πρόκειται για προβλήματα τριών διαστάσεων (3Δ) με υψηλές βαθμώσεις των συναρτήσεων πεδίου. Επιπλέον, αυτές οι παραδοσιακές μέθοδοι είναι συχνά πολύ αργές στη σύγκλισή τους, απαιτώντας την επίλυση χιλιάδων εξισώσεων προκειμένου να επιτευχθεί η επιθυμητή ακρίβεια.

Τα τελευταία έτη μια καινοτόμος ομάδα τεχνικών, καλούμενες «Απλεγματικές» μέθοδοι (Meshless methods), έχει ταχύτατα αναπτυχθεί και έχουν τραβήξει την προσοχή της επιστημονικής κοινότητας. Είναι μια κατηγορία αριθμητικών τεχνικών που βασίζονται σε παρεμβολές τοπικού τύπου σε ακανόνιστα κατανεμημένες χωρικές κατανομές σημείων. Στις μεθόδους αυτές, σε καμία φάση της διαδικασίας επιλύσεως του αντίστοιχου προβλήματος, δεν απαιτείται πολυγωνοποίηση είτε του υπολογιστικού χωρίου είτε της επιφάνειάς του. Το κύριο πλεονέκτημά τους έναντι των παραδοσιακών αριθμητικών μεθόδων που βασίζονται σε πλέγματα είναι το γεγονός ότι συνήθως δεν υπάρχει ανάγκη για ύπαρξη πλέγματος και της γνώσης της συνδεσιμότητας μεταξύ γειτονικών στοιχείων, μειώνοντας έτσι την προσπάθεια που αφιερώνεται στην παραγωγή πλέγματος. Οι μέθοδοι αυτές είναι σχεδιασμένες έτσι ώστε να χειρίζονται προβλήματα με μεγάλη παραμόρφωση, κινούμενα όρια και πολύπλοκη γεωμετρία.

Σήμερα υπάρχουν διαφόρων τύπων απλεγματικές μέθοδοι, όπου κάθε μία εξ αυτών παρουσιάζει πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα. Για τον λόγο αυτό το διεθνές ερευνητικό ενδιαφέρον εστιάζεται και στη βελτίωση των μεθόδων αυτών. Αυτές οι τεχνικές είναι υπό ανάπτυξη συνεχώς τα τελευταία χρόνια [1-4]. Για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων ασυμπίεστης, στρωτής ροής ρευστού έχουν προταθεί διάφορες απλεγματικές μέθοδοι, λαμβάνοντας υπόψη τόσο διαφορικές (ισχυρές, strong) όσο και ολοκληρωτικές (ασθενής, weak) προσεγγίσεις [5, 6]. Πιο συγκεκριμένα, απλεγματικές μέθοδοι τοπικής ταύτισης και μέθοδοι τοπικών προσεγγίσεων Petrov-Galerkin (MLPG) [4] χρησιμοποιούνται συχνά για την επίλυση προβλημάτων ροής. Οι δύο τελευταίες μέθοδοι είναι πραγματικά απλεγματικές δεδομένου ότι δεν απαιτείται πλέγμα σε καμία φάση επίλυσης.

Λίγες μελέτες επικεντρώνονται σε τρισδιάστατες ροές, και ακόμη λιγότερες σε ακανόνιστες γεωμετρίες. Στην παρούσα εργασία, η απλεγματική μέθοδος τοπικής ταύτισης χρησιμοποιείται για την αριθμητική επίλυση της τρισδιάστατης παροδικής, ασυμπίεστης, στρωτής εξίσωσης ροής του ρευστού. Οι ισχύουσες εξισώσεις, εκφράζοντας τη διατήρηση της μάζας και ορμής, όπου γραμμένο σε σκευάσματα ταχύτητας-στροβιλότητας τους. Οι συνιστώσες της ταχύτητας λυθεί χρησιμοποιώντας ένα Poisson σαν ελλειπτικές εξισώσεις, ενώ μια μέθοδο ταχύτητας-διόρθωση εφαρμόζεται για τις εξισώσεις ορμής.

Για τον υπολογισμό της ροής εφαρμόστηκε και η μέθοδος Lattice-Boltzmann προτύπου BGK μονής χαλάρωσης, τετραγωνικού πλέγματος 9 ταχυτήτων (D2Q9) σε δύο διαστάσεις και κυβικού εδροκεντρωμένου πλέγματος 15 ταχυτήτων (D3Q15) [7]. Αποδεικνύεται ότι από τις πλεγματικές μεθόδους η μέθοδος Lattice-Boltzmann είναι προτιμητέα αφενός λόγω της ευελιξίας της αντιμετώπιση των τυχαίων γεωμετριών και αφετέρου λόγω της ταχύτερης σύγκλισης του πεδίου ροής [8, 9].

###  ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΚΥΛΙΟΜΕΝΩΝ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ

Μεταξύ των διαθέσιμων συστημάτων απλεγματικής προσέγγισης, η μέθοδος Κυλιόμενων Ελαχίστων Τετραγώνων (MLS) [10] θεωρείται γενικά για να είναι μια από τις καλύτερες και ευρέως χρησιμοποιούμενες μεθόδους για να παρεμβάλει τυχαία δεδομένα με εύλογη ακρίβεια, λόγω της πληρότητας του, της ευστάθειάς τους και της παροχής συνεχούς λύσης σε όλο το πεδίο επίλυσης. Στο πλαίσιο της μεθόδου MLS, μια άγνωστη μεταβλητή πεδίου *u*(***x***) προσεγγίζεται από *uh*(***x***) και εκφράζεται ως

  (1)

όπου ***p*T**(***x***) είναι πολυωνυμική βάση στις συναρτήσει χώρου, και *m* είναι ο συνολικός αριθμός όρων στη βάση (εδώ *m*=6 εφόσον χρησιμοποιούμε 2ης τάξης πολυώνυμο) και ***α***(***x***)=(***α1***(***x***), ***α2***(***x***),…, ***αm***(***x***))***T*** είναι διάνυσμα συντελεστών. Χρησιμοποιήσαμε το πολυώνυμο μετατοπισμένης βάσης, η οποία για δισδιάστατο χωρικό πεδίο ορίζεται ως

  (2α)

και για τρισδιάστατο χωρικό πεδίο:

  (2β)

οπου ***xc*** είναι το κέντρο του τομέα υποστήριξης (support domain) στο οποίο λαμβάνεται η προσέγγιση στο σημείο ***x***. Ο τομέας υποστήριξης είναι ο τομέας όπου η τρέχουσα τιμή όλων των κόμβων μέσα σε αυτόν χρησιμοποιείται για να καθορίσει τις πληροφορίες στο σημείο *x*, Σχήμα 1.



**Σχήμα 1**. Ενδεικτικό χωρίο Προσέγγισης Ελαχίστων Τετραγώνων. Ω: χωρίο διεργασίας, ∂Ω: όριο χωρίου διεργασίας, Ωi: χωρίο υποστήριξης γύρω από κόμβο i.

Προκειμένου να προσδιοριστεί η μορφή του ***α***(***x***), κατασκευάζεται ένα σταθμισμένο διακριτό σφάλμα (ορίζουσα) και ελαχιστοποιείται

  (3)

*ui*=*u*(***x****i*) είναι η κομβική τιμή της κατά προσέγγιση συνάρτησης στο κόμβο *i*, *n* είναι ο αριθμός των κόμβων στο πεδίο υποστήριξης του υπολογιστικού σημείου που βρίσκεται στο ***x***, και η συνάρτηση βάρους *wi*(***x***)=*w*(***x****i*-***x****c*) κατασκευάζεται συνήθως με τέτοιο τρόπο ώστε να καθίσταται μονάδα στην περιοχή του σημείου ***x****i*,, όπου η συνάρτηση και οι παράγωγοί της είναι να υπολογιστούν, και μηδενίζεται εκτός της περιοχής υποστήριξης *Ωi* κόμβου *i*, που περιβάλλει το σημείο ***x****i*. Η επιλογή της συνάρτησης βάρους *w*(***x***-***x****I*) (στο παρόν έργο χρησιμοποιείται συνάρτηση βάρους τύπου Gauss [11]) επηρεάζει την προσέγγιση *uh*(***x***) σημαντικά. Με την ελαχιστοποίηση της ορίζουσας οι πίνακες **A**(***x***) και **B**(***x***) ορίζονται ως

  (4)

  (5)

Εάν ο πίνακας **A**(***x***) είναι αντιστρέψιμος, οι συντελεστές ***α***(***x***) μπορούν να εκφραστούν ως

  (6)

Η προσέγγιση της συνάρτησης *u*(***x***) μπορεί τώρα να γραφεί ως

  (7)

όπου *φi*(***x***) είναι η συνάρτηση σχήματος του κόμβου *i*, οριζόμενη ως

  (8)

Η συνάρτηση σχήματος *φi*(***x***) αναλύεται ως

  (9)

Οι παράγωγοι της συνάρτησης σχήματος μπορούν να ληφθούν με κατάλληλη διαφόριση της Εξ. (9) ως προς τις χωρικές συντεταγμένες.

**ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ**

1. T. Belytschko, Y.Y. Lu, L. Gu, Element-Free Galerkin Methods, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, **37**, 229-256 (1994)

2. W.K. Liu, S. Jun, S. Lit, J. Adee, T. Belytschko, Reproducing kernel particle methods for structural dynamics, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, **38**, 1655-1679 (1995)

3. E. Oñate, S. Idelsohn, O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, C. Sacco, A stabilized finite point method for analysis of fluid mechanics problems, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **139**, 315-346 (1996)

4. S.N. Atluri, T. Zhu, A new meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics, *Comput. Mech.*, **22**, 117-127 (1998)

5. S.N. Atluri, S. Shen, The basis of meshless domain discretization: The meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method, *Adv. Comput. Math.*, **23**, 73-93 (2005)

6. G.R. Liu, *Meshfree Methods: Moving Beyond the Finite Element Method, Second Edition*, CRC Press, 2009

7. A.N. Kalarakis, V.N. Burganos, A.C. Payatakes, Three-dimensional lattice-Boltzmann model of van der Waals fluids, *Phys. Rev. E Stat. Nonlinear Soft Matter Phys.*, **67**, 167021-167028 (2003)

8. V.K. Michalis, A.N. Kalarakis, E.D. Skouras, V.N. Burganos, Mixing within fracture intersections during colloidal suspension flow, *Water Resour. Res.*, **45** (2009)

9. A.N. Kalarakis, G.C. Bourantas, E.D. Skouras, V.C. Loukopoulos, V.N. Burganos, Lattice-Boltzmann and meshless point collocation solvers for fluid flow and conjugate heat transfer, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **70**, 1428-1442 (2012)

10. P. Lancaster, K. Salkauskas, Suefaces generated by Moving Least-Squares methods, *Math. Comput.*, **37**, 141-158 (1981)

11. G.C. Bourantas, E.D. Skouras, V.C. Loukopoulos, G.C. Nikiforidis, Numerical Solution of Non-Isothermal Fluid Flows Using Local Radial Basis Functions (LRBF) Interpolation and a Velocity-Correction Method, *CMES-Comp. Model. Eng.*, **64**, 187-212 (2010)