



Програм докторских студија Биоинформатика

ДОКТОРСКА ДИСЕРТАЦИЈА

**Тема: Нумеричко моделирање кретања ћелија, микро и нано
делића у крвним судовима**

Ментор:

Проф. Др **Милош Којић**, дописни члан САНУ

Кандидат:

Велибор Исаиловић, дипл. инж.

Београд, 2012

Нумеричко моделирање кретања ћелија, микро и нано делића у крвним судовима

Велибор Исаиловић

Факултет информacionих технологија
Универзитет Метрополитан

Резиме

Струјање крви у кардиоваскуларном систему је предмет бројних истраживања у медицини и биомедицинском инжењерингу. Истраживања се углавном базирају на експериментима, али значајну улогу у истраживањима има и компјутерско моделирање. Крв се састоји од течне крвне плазме и чврстих крвних ћелија. Струјање у великим крвним судовима се моделира као струјање вискозног нестишљивог флуида. За велике крвне судове ово је задовољавајућа апроксимација, зато што су димензије ћелија занемарљиве у односу на димензије крвног суда.

Када је у питању струјање у малим крвним судовима (капиларима), димензије ћелија су сличне димензијама попречног пресека крвних судова. Присуство ћелија у крви се у том случају не може занемарити у моделирању. Пошто је данас актуелна примена нанотехнологије у лечењу малигних болести, што подразумева убризгавање нано честица у крвоток, од интереса је утврдити путем нумеричких модела и кретање нано честица које се кроз крв преносе заједно са крвним ћелијама.

Циљ овог рада је развој нумеричког модела који ће објединити кретање солида и флуида у крви. Модел треба да обезбеди интеракцију чврстих тела (ћелија и наночестица) и флуида (крвне плазме) као и узајамну интеракцију ћелија и нано честица.

Numerical modeling of motion of cells, micro and nano particles in blood vessels

Velibor Isailovic

Faculty of Information Technology
Belgrade Metropolitan University

Abstract

Blood flow in cardiovascular system is the subject of numerous research studies in medicine and biomedical engineering. These studies are mostly based on experiments, but computer modeling has an important role in the research, as well. Blood consists of liquid blood plasma and solid blood cells. The flow in large blood vessels is modeled as a flow of viscous incompressible fluid. This is a satisfactory approximation for large blood vessels, because the dimensions of the cells are negligible in comparison with dimensions of the blood vessel.

Regarding the flow in small blood vessels (capillaries), the dimensions of the cells are similar to the dimensions of cross sections of blood vessels. Presence of the cells in blood cannot be neglected in this case. Since today use of nanotechnology in the treatment of malignant diseases is a hot topic, which implies injection of nanoparticles into the bloodstream, it is of interest, using numerical models, to determine motion of nanoparticles transported through blood together with blood cells.

The objective of this thesis is the development of numerical models that will couple solid and fluid motion in blood. The model should include fluid-solid interaction (interaction of cells and nanoparticles with blood plasma), as well as mutual interaction between cells and nanoparticles.

Предговор

Током основних студија на Машинском факултету у Крагујевцу, стекао сам теоријска знања из разних области инжењерства. Сви они интегрални и диференцијални једначине које сам решавао на испитима из статике, кинематике, динамике, отпорности материјала, термодинамике, механике флуида, теорије осцилација и сл. изгледали су сасвим логично, али ми све време није било јасно како се то примењује у пракси. Реални проблеми су толико сложени да се не наслућује готово никаква сличност са испитним задацима. Први моменат, када сам схватио да све те једначине и те како имају примену у пракси, био је када сам пратио курс из методе коначних елемената код др Мирослава Живковића, редовног професора Факултета инжењерских наука Универзитета у Крагујевцу и дугогодишњег сарадника професора Милоша Којића – зачетника научног и образовног рада у области нумеричких метода и развоја рачунарских програма на Универзитету у Крагујевцу. Тада сам схватио да мора још много да се учи и ради, како би диплома машинског инжењера добила прави смисао.

За успешно обављену својеврсну нострификацију дипломе Машинског факултета, највећу захвалност дугујем свом ментору, професору Милошу Којићу, дописном члану Српске академије наука и уметности и научном сараднику института The Methodist Hospital Research Institute у Хјустону. Захваљујући раду са својим ментором, стекао сам знање и искуство у решавању практичних проблема, које сам на почетку наше вишегодишње сарадње само наслућивао. Такође, веома велику захвалност дугујем и др Ненаду Филиповићу, редовном професору Факултета инжењерских наука Универзитета у Крагујевцу. Захваљујући раду са професором Којићем и професором Филиповићем, стекао сам знања из неколико различитих инжењерских области, иза којих, у основи, стоји сличан математички апарат.

Велику захвалност дугујем и тиму у који ме је професор Којић увео. Центар српске академије наука и уметности и Универзитета у Крагујевцу, у оквиру кога су извођени пројекти из биоинжењеринга, окупљао је између осталих данашње доценте Универзитета у Крагујевцу. За брзо напредовање у програмерским водама захваљујем се др Милошу Ивановићу и др Бобану Стојановићу, доцентима Природно – математичког факултета Универзитета у Крагујевцу и др Владимиру Ранковићу, доценту Економског факултета универзитета у Крагујевцу.

За прве кораке у програмирању нумеричких метода и упознавању са програмским пакетом ПАК, захваљујем се др Иву Властелици, доценту Факултета информационих технологија Универзитета Метрополитан и професору Високе школе техничких струковних студија у Чачку.

Захваљујем се свим члановима и сарадницима тима који данас воде професори Којић и Филиповић у оквиру Истраживачко развојног центра за биоинжењеринг – БиоИРЦ – Универзитет Метрополитан, у коме данас радим. Такође, посебну захвалност дугујем ректору Универзитета Метрополитан, др Драгану Домазету, који је пружио веома значајну подршку у реализацији програма докторских студија Биоинформатика на Факултету информационих технологија Универзитета Метрополитан.

Захваљујем се професору др Мауру Ферарију, директору института The Methodist Hospital Research Institute у Хјустону, за усмеравање нашег рада на најсавременије истраживачке пројекте из области моделирања кретања ћелија и нано честица у крвним судовима, из којих је настала ова теза.

Захваљујем се др Николи Којићу, научном сараднику Massachusetts General Hospital, Harvard Medical School и доценту Факултета информационих технологија Универзитета Метрополитан, за сарадњу у области моделирања микрофлуидних чипова за сепарацију ћелија.

Захваљујем се на дугогодишњој сарадњи у области моделирања и симулација струјања подземних вода др Милану Димкићу, директору Института за водопривреду Јарослав Черни, и ванредном професору Факултета техничких наука Универзитета у Новом Саду, са којим сам имао задовољство да учествујем у раду на развоју модела струјања подземних вода.

За разјашњења малих и великих математичких недоумица које се свакодневно срећу у овом послу, захваљујем се др Дејану Вељковићу, научном сараднику истраживачко развојног центра за биоинжењеринг – БиоИРЦ у Крагујевцу.

Захваљујем се ресорном Министарству за учешће на националним научно истраживачким пројектима.

Захваљујем се скупштини града Крагујевца, на дугогодишњој материјалној и медијској подршци у спровођењу програма за биоинжењеринг, како у Центру Српске академије наука и уметности и Универзитета у Крагујевцу, тако и у Истраживачко развојном центру за биоинжењеринг – БиоИРЦ у Крагујевцу.

За тренутке који животу дају забавну димензију и пружају додатну енергију да се у каријери и академском напредовању крене корак даље, захваљујем се својим дугогодишњим пријатељима Николи Туцаковићу и Владимиру Тошићу.

Највећу захвалност за све оно учињено да стигнем где сам данас, дугујем својим родитељима, Миловану и Мили, сестри Бисерки и девојци Наташи.

Велибор Исаиловић

Садржај

1	УВОД	15
1.1	О кретању тела у флуиду.....	17
1.2	Кретање тела у крвним судовима.....	19
2	ПРЕГЛЕД НУМЕРИЧКИХ ПОСТУПАКА МОДЕЛИРАЊА СОЛИД-ФЛУИД ИНТЕРАКЦИЈЕ	23
3	РАЗЛИЧИТИ КОНЦЕПТИ У ПРИМЕНИ ЈАКОГ СПРЕЗАЊА	29
3.1	Основне једначине кретања флуида и солида и њихова трансформација на дискретизовани облик методом коначних елемената	29
3.1.1	Лагранжев и Ојлеров опис кретања континуума	29
3.1.2	Једначине кретања солида	33
3.1.3	Једначине струјања флуида	39
3.2	Ојлерова формулација	46
3.2.1	Основни концепт.....	46
3.2.2	Основне једначине за солид.....	47
3.2.3	Кораци у прорачуну	49
3.3	Примена Лагранжевих множилаца	50
3.3.1	Варијациони принцип	50
3.3.2	Ограничења чворова солида који се налазе на спољашњој граници	50
3.3.3	Интерполација брзина	52
3.3.4	Ограничења чворова на граници солида – алтернативна формулација	53
3.4	Примена методологије вишеструких ограничења ("Multipoint Constraints")	56
3.4.1	Интерполација брзина за чворове на граници флуида	56
3.4.2	Модификација једначине баланса коначног елемента флуида	57
3.4.3	Кораци у прорачуну	59
3.5	Метода потопљене границе [73] („Immersed Boundary Method“).....	60
3.5.1	Детаљи у формирању једначина.....	60
3.5.2	Кораци у прорачуну	64

Резиме	65
4 МЕТОДОЛОГИЈА ЗАСНОВАНА НА АЖУРИРАЊУ МРЕЖЕ У ТОКУ КРЕТАЊА ТЕЛА	69
4.1 Основни концепт	69
4.1.1 Повезивање једначина солида и флуида у заједнички систем једначина	70
4.2 Приказ концепта ажурирања мреже у сваком кораку	72
4.2.1 Генерисање мреже	72
4.2.2 Ажурирање мреже и мапирање резултата из последњег познатог решења	73
4.3 Моделирање интеракције између солида	78
4.3.1 Линијски коначни елемент (штап).....	78
4.3.2 Равнотежа елемента и матрица крутости.....	81
4.3.3 Примена линијског елемента за моделирање интеракције	86
5 РЕЗУЛТАТИ – МОДЕЛИ КРЕТАЊА ДЕЛИЋА У ПОЉУ СМИЦАЈНОГ СТРУЈАЊА	91
5.1 Студија кретања тела у пољу са константном брзином смицања	91
5.2 Применљивост Стоксових и Навије – Стоксових једначина	97
6 РЕЗУЛТАТИ - МОДЕЛИРАЊЕ КРЕТАЊА ЋЕЛИЈА И ДЕЛИЋА У КРВНИМ СУДОВИМА И ЧИПОВИМА ЗА СЕПАРАЦИЈУ ЋЕЛИЈА	101
6.1 Кретање у капилару.....	101
6.2 Кретање у артеријама	110
6.3 Модели кретања ћелија у чиповима за сепарацију ћелија.....	114
7 ЗАКЉУЧЦИ	127
ДОДАТАК А	133
Тотал Лагранж (Total Lagrangian) формулација за решавање геометријски нелинеарних проблема ..	133
ДОДАТАК Б	137

Верификациони пример пропадања диска између две плоче [32].....	137
Верификациони пример кретања тела под дејством сила флуида и гравитационих сила [56]	140
ДОДАТАК Ц	143
Шематски приказ рада програма за моделирање солид – флуид интеракције	143
8 ЛИТЕРАТУРА	149

1 Увод

Савремена истраживања у области природних, техничких, медицинских, па чак и неких дрштвених наука, готово су незамислива без примене компјутерског моделирања и симулација. Компјутерске симулације су постале веома користан део математичког моделирања многих појава у физици, астрофизици, хемији, биологији, медицини, економији, инжењерингу, итд. Моделирање и симулације се могу користити за истраживање како би се стекли нови увиди у процесе који су моделирани. Такође, моделирање има значајну улогу у процени перформанси система који су превише сложени за аналитичко решавање.

Примери примене моделирања и симулација у разним научним областима су веома бројни. У физици и хемији се често користе Монте Карло методе [20]. Ове методе су стохастичке, и примењују се на системе који не могу да се опишу детерминистички (или је детерминистички опис веома компликован). Базирају се на примени великог броја случајних узорака и великом броју израчунавања и понављања, како би се предвидело понашање неког сложеног система. У хемији је врло заступљено моделирање методом молекуларне динамике [63]. Ова метода у основи користи Њутнову једначину кретања за систем честица које су у интеракцији. Молекулски системи се састоје од великог броја честица, па је немогуће аналитички одредити особине тако сложених система. Молекуларна динамика савлађује овај проблем применом нумеричког решавања једначина које описују систем. У економији се често манипулише великом количином података добијених статистичким анализама. Такви подаци су практично неупотребљиви без примене компјутерског моделирања. Data Mining (ДМ) методе [72] (методе претраживања података) се веома често користе за системе код којих су познати само улазни и излазни параметри. Применом ДМ метода могуће је на основу познатих података успоставити одређене релације, и на основу њих проценити понашање система за произвољне улазне параметре.

Последњих година тежње у светској науци су све више усмерене на примену знања из разних природних и техничких наука на истраживања у биологији и медицини. Оваква истраживања су временом постајала све бројнија и опширнија. Синтеза техничких дисциплина са медицином и биологијом довела је до појаве новог научног поља – биомедицинског инжењеринга. Биомедицински инжењеринг представља научно поље

у коме се фундаментални принципи инжењеринга примењују у медицини и биологији. Ово поље тежи да комбинује инжењерске методе решавања проблема са медицином и биологијом, са циљем да се унапреди здравствена дијагноза, праћење стања пацијената и терапија. Биомедицински инжењеринг обухвата широк спектар подобласти: развој протеза, развој клиничке опреме, инжењеринг ткива, развој и дизајн фармацеутских производа, итд. У свим овим гранама биомедицинског инжењеринга моделирање заузима значајну улогу. У овом раду ће бити представљене неке од могућности које пружа примена нумеричких метода и компјутерског моделирања.

1.1 О кретању тела у флуиду

Кретање тела у флуиду је проблем који се релативно често среће у инжењерској пракси. Навешћемо само неке од бројних примера кретања тела у стишљивим и нестишљивим флуидима: кретање авиона у ваздуху, кретање подморница, кретање лопте кроз ваздух у разним спортовима (фудбал, тенис, голф, итд.), транспорт чврстих материја флуидом у индустријским погонима за прераду целулозе, транспорт минералних сировина у рудницима, итд.

У биолошким системима се такође често сусреће проблем кретања кругих и чврстих (еластичних) тела у флуиду. Неки карактеристични примери су кретање честица аеросола у дисајним путевима, кретање црвених крвних зрнаца и других ћелија у кардио – васкуларном систему, итд.

Последњих година се велики напори у науци улажу у развој експерименталне опреме за сепарацију (раздвајање) здравих и оболелих ћелија. За раздвајање се користе такозвани чипови кроз које се пропушта крв. Унутрашњост чипова је обложена слојем антитела која могу да привуку оболеле ћелије и да их вежу за зидове. Запремински удео ћелија у крви је око 46%, па струјање крви у чиповима такође представља проблем интеракције флуида и чврстих тела.

За све претходно описане проблеме заједничко је да се тела крећу под дејством сила које настају струјањем флуида, или да се тела под дејством спољашњих сила крећу кроз флуид у мировању. Кретање деформабилног тела се може описати применом Њутнових диференцијалних једначина баланса сила, а струјање вискозног нестишљивог флуида применом Стоксових или Навије – Стоксових једначина (које су такође облик Њутнових једначина). Дискретизацијом ових једначина методом коначних елемената и спрезањем у заједнички систем, добија се систем једначина чијим решавањем добијамо дискретно решење поља брзина и притисака у флуиду, и поља брзина (односно поља померања) у солиду.

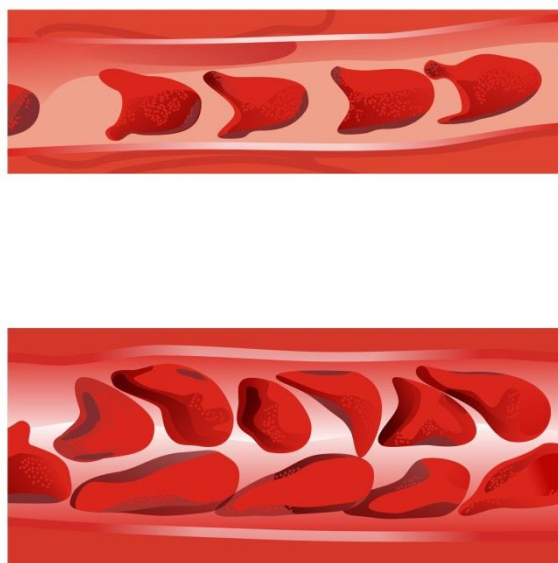
Осим проблема интеракције флуида и чврстих тела, при кретању више делића солида у флуиду потребно је на одговарјући начин узети у обзир узајамну интеракцију чврстих тела, као и њихову интеракцију са зидовима крвних судова. Ово представља још један

додатни изазов, пошто је проблем контакта између два тела сам по себи веома компликован за моделирање.

Моделирањем описаних проблема кретања тела у флуиду могу се расветлити неки детаљи који се не могу видети чак ни коришћењем најсавременије експерименталне опреме.

1.2 Кретање тела у крвним судовима

Крв је течност која се састоји од суспензије ћелија, протеина и јона у плазми. Ћелије које чине крв су: црвена крвна зрнца (еритроцити), бела крвна зрнца (леукоцити) и крвне плочице (тромбоцити). У нормалној крви, ове три врсте ћелија чине око 46% укупне запремине. Основна функција крви је снабдевање ткива кисеоником и хранљивим материјама, и одстрањивање угљендиоксида и свих метаболичких продуката из ткива. Готово половину запремине крви чине крвне ћелије, за које се сматра да значајно утичу на карактеристике циркулације крви. Крв тече из срца у артерије – велике крвне судове, које се гранају у мање крвне судове - артериоле, а оне се затим гранају у најмање крвне судове – капиларе. Пречник капилара је величине 5 до 10 μm . На слици 1-1 шематски је приказан изглед црвених крвних зрнаца у капиларима.



Слика 1-1: Црвена крвна зрнца у капиларима [39]

Црвена крвна зрнца (eng. Red Blood Cells – RBC) су најбројнија врста ћелија у организму. Имају облик биконкавног диска, пречника 8 μm и дебљине 2 μm . Састоје се од спољашње еластичне мембране која је испуњена течношћу. Основна функција црвених крвних зрнаца је транспорт гасова: кисеоника од плућа до ткива и угљен диоксида у обрнутом смеру. Пречник црвених крвних зрнаца је већи од пречника капилара, па су при проласку кроз капиларе, она изложена врло великим деформацијама.

Веома је значајно истражити струјање крви у оваквим крвним судовима, како би се стекао нови увид у процес проласка црвених крвних зрнаца кроз капиларе. Сматра се да кретање ћелија у близини зидова крвних судова, у пољу са смичућим профилом брзине, игра значајну улогу у процесу стварања тромбозе [53]. Такође, корист од оваквих истраживања огледа се и у одређивању карактеристика крви и откривању поремећаја у струјању крви у капиларима.

Употреба нанотехнологије са циљем контролисане дистрибуције лекова у организму је предмет најновијих истраживања у области биоинжењеринга. Нарочито је интересантна дистрибуција цитостатика – хемијских супстанци које се користе за спречавање раста и развоја малигнућ ћелија и ткива. У досадашњим методама лечења цитостатици су убризгавани у кардиоваскуларни систем. На тај начин они доспевају до свих делова организма. Међутим, примена цитостатика често је праћена појавом нежељених ефеката. Цитостатици не делују селективно на малигне процесе, већ, у мањој или већој мери, уништавају и део здравих ћелија, што може довести до појаве бројних нежељених реакција. Велики број данашњих истраживања посвећен је развоју тзв. паметних нано честица (енг. smart nanoparticles) које поседују способност препознавања малигнућ ћелија. Овакве нано честице представљају минијатурне контејнере који у себи носе цитостатике. Пошто су у стању да препознају оболеле ћелије, дизајнирају се тако да када се нађу у њиховој близини, вежу се за њих и испоруче цитостатик који са собом носе. На овај начин се остварује локално дејство цитостатика. За људски организам је много повољнија оваква методологија лечења, јер је ризик од појаве нежељених ефеката вишеструко мањи. Помоћу оваквих метода лечења омогућено је да се применом много мање количине цитостатика у односу на традиционалне методе, добије сличан или чак бољи ефекат у спречавању даљег раста и развоја малигнућ ћелија.

Из претходно наведених примера, може се закључити да је изучавање кретања честица у крвним судовима од изузетног значаја. Најзначајније резултате у овој области дају експериментална истраживања, али су, због технологије израде експерименталне опреме, веома скупа. Управо због тога, нумеричко моделирање оваквих проблема има значајну улогу. Такође, нумеричко моделирање може знатно помоћи у откривању биохемијских механизма који су присутни у процесу транспорта и дејства лекова. Да би се дошло до адекватног математичког модела, неопходно је прво развити модел

којим се могу решити једноставнији примери за које постоје аналитичка или експериментална решења [22],[23],[24],[25],[30]. Нумерички модел, који може успешно да реши овакве проблеме, можемо даље користити за моделирање компликованијих проблема који се иначе истражују експериментално. На тај начин може се значајно смањити број експеримената. Уколико нумеричко решење неког експеримента не одступа значајно од експерименталних резултата, тада се може урадити читав серија ”нумеричких експеримената” са циљем унапређења дизајна нано честица и доношења закључака у вези са њиховим кретањем кроз крвоток.

Овај рад ће бити оријентисан на моделирање кретања тела у струји флуида методом коначних елемената. Развијени нумерички модел биће примењен на изучавање проблема кретања ћелија и нано честица у крвним судовима, код којих је нарочито интересантан пролазак ћелија кроз микро крвне судове са сужењима чији је пречник мањи од димензија ћелија. Такође, модел ће бити примењен и на истраживање струјања крви у чиповима за сепарацију ћелија. Експерименталним истраживањима струјања у чиповима добија се резултат сепарације, али се не може видети како се сам процес одвија. Моделирањем оваквих експеримената могуће је стећи увид у процес везивања ћелија за зидове чипа. Компјутерске симулације могу дати значајан допринос у пројектовању чипова за сепарацију, јер се на основу слике струјања и симулације путања ћелија могу донети битни закључци приликом пројектовања и оптимзације облика чипова.

2 Преглед нумеричких поступака моделирања солид-флуид интеракције

У овој глави се укратко представљају методе решавања солид-флуид интеракције на којима је рађено на Универзитету у Крагујевцу и у Истраживачко развојном центру за биоинжењеринг у Крагујевцу са циљем да се утврди поуздана методологија за остварење постављених задатака овог рада.

Нумеричко моделирање солид – флуид интеракције је деценијама уназад представљало велики истраживачки изазов. Сам појам солид – флуид интеракције се односи на различите класе проблема. Једна класа је моделирање интеракције флуида који струји унутар домена солида (кроз цев, између две плоче, итд.). У овом случају солид је ограничен у простору, а померања која може да има су само последица деформација солида услед сила које се јављају у флуиду. Друга класа проблема је када солид може слободно да се креће у флуиду. У овом случају померања солида настају услед кретања изазваног силама у флуиду и, такође, услед деформисања солида под дејством ових сила. Циљ ове дисертације је развој методе која би на задовољавајући начин решила проблем кретања тела у флуиду.

Постоји велики број метода које се користе за нумеричко моделирање солида и флуида. Свака од ових метода је базирана на једначинама које описују понашање солида или флуида. За решавање проблема солид – флуид интеракције потребно је успоставити међусобну зависност између ових једначина, које су на први поглед веома различите. У наставку ће бити размотрене неке од метода које се могу применити на решавање проблема солид – флуид интеракције.

Глатка честична хидродинамика (Smooth Particle Hydrodynamics – SPH) је безмрежна метода која се примењује у рачунској механици [36]. Ова метода је концептуално веома једноставна и заснива се на Лагранжевој формулацији. SPH метода ради тако што се флуид представи скупом дискретних елемената, које називамо честицама. Физичка величина било које честице може се добити сабирањем особина свих честица које се налазе у домену “кернел” функције посматране тачке. Један од могућих начина моделирања кретања тела у флуиду методом SPH је да се солид посматра као други флуид, при чему честице солида на окупу држи површински напон

[36]. Ова метода примењена на примерима пропадања крутог тела кроз домен флуида даје резултате задовољавајуће тачности. Међутим, за кретање црвених крвних зрнаца у крвним судовима, ова методологија није адекватна. Црвена крвна зрнаца су деформабилна тела, која се при проласку кроз капиларе деформишу, тако да је неопходно узети у обзир силе (односно напоне) којима се материјал ћелија супроставља деформисању.

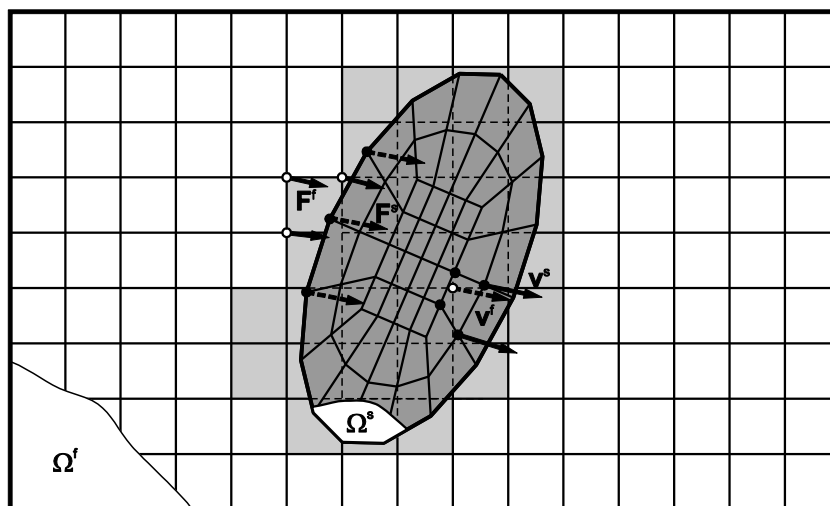
Стоксова динамика је такође једна од метода која се примењује на решавање проблема солид – флуид интеракције. Метода се заснива на израчунавању сила и момената који делују на честице помоћу Стоксове једначине за струјање флуида, занемаривањем ефеката кретања честица на струјање флуида [21], [37], [55], [64]. Уобичајен начин решавања проблема кретања честица је примена Њутнових закона кретања честица, које су изложене дејству сила флуида, без утицаја кретања честица на струјање флуида. Флуид се може моделирати на различите начине, као Стоксово струјање [21], [22] - [25], или коришћењем директне нумеричке симулације (ДНС) [74]. Ова метода даје добра решења, али је ограничена на моделирање проблема интеракције флуида само са крутим телима.

Lattice Boltzmann метода (ЛБМ) [11], [9], је једна од најчешће коришћених честичних метода за моделирање струјања флуида. Флуид се посматра на молекуларном нивоу, тако да је модел формулисан сударима између честица (молекула). У последњих неколико година остварени су значајни помаци у ЛБМ. Метода се веома успешно примењује на моделе са сложеним струјањима флуида, као што су струјање вишекомпонентних флуида кроз порозне медијуме, или струјање кроз микро и нано канале. ЛБМ је једноставна за нумеричку имплементацију. Основне ЛБМ једначине могу се извести из Болцманове једначине, која важи за домен континуума. Коришћењем одређених математичких процедура, Болцманова једначина се може трансформисати на познати систем Навије – Стоксових једначина и једначине континуитета. Болцманова једначина је парцијална диференцијална једначина, која описује кретање честица у простору употребом функције расподеле честица изведене из кинетичке теорије гасова. Ова функција расподеле представља вероватноћу присуства честице у одређеном просторном домену у времену.

ЛБМ се може успешно применити и на решавање проблема солид – флуид интеракције. Домен флуида који је обухваћен доменом солида се сматра да је

недеформабилан. Дејство флуида на солид, у тачкама које су граница флуида и солида, замењује се силама, којима се одржава почетни облик контуре солида. Овом методом могуће је моделирати и еластична деформабилна тела, применом одговарајућих једначина за израчунавање сила унутар солида. Међутим, оваква метода није погодна за моделирање геометријски и материјално нелинеарних проблема механике чврстих тела [2], [39], [76].

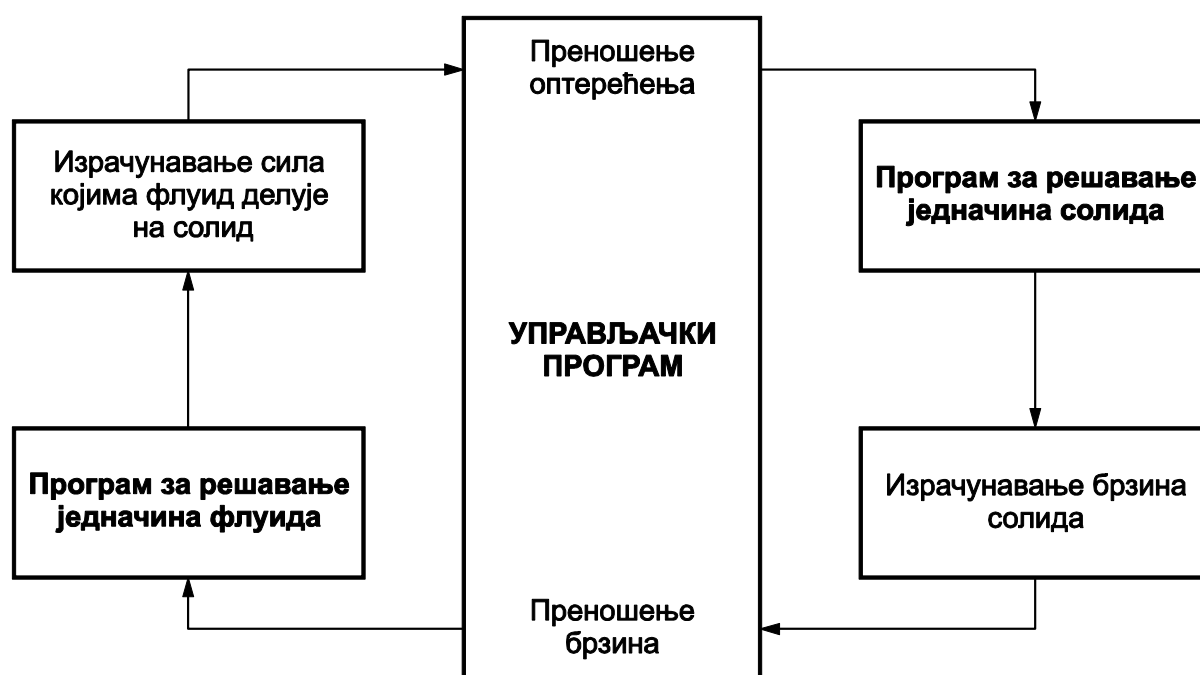
Метода коначних елемената – слабо спрезање је један приступ који се користи у решавању солид-флуид интеракције. Иначе метода коначних елемената (МКЕ) је једна од метода која има најширу примену у решавању различитих врста физичких проблема. Примена ове методе у механици континуума је веома распрострањена. Примењује се, како за решавање проблема кретања и деформисања чврстих тела, тако и за решавање проблема динамике флуида. Програми који се користе за решавање оваквих проблема су независни и имају своје специфичности. Да би се применили на решавање проблема солид – флуид интеракције потребно их је на неки начин повезати. Једна од метода која се користи за овакве проблеме је такозвано “слабо спрезање“ (енг. loose coupling). Ова метода се заснива на независном решавању домена солида и домена флуида и преношењу одговарајућих физичких величина из домена флуида у домен солида и обрнуто.



Слика 2-1: Слабо спрезање у методи коначних елемената

У првом кораку инкременталне анализе прво се решава домен флуида са одговарајућим почетним и граничним условима. Чворови елемената флуида који се налазе унутар домена солида, као и чворови елемената које пресеца спољашња контура солида, су

ограничени. Решавањем домена флуида добија се и решење за силе којима флуид делује на контуру која обухвата ограничене чворове флуида (чворови флуида који се налазе унутар домена солида). Ове силе (\mathbf{F}^f на слици 2-1) се затим задају као гранични услов у солиду (задате силе \mathbf{F}^s). Решавањем једначина солида добија се решење за поља померања и брзина у солиду. Затим се изврши померање солида и брзине из солида \mathbf{v}^s интерполацијом пренесе као гранични услов за нови корак у флуиду (задате брзине \mathbf{v}^f). Тиме је дефинисан један комплетан циклус решавања флуида и солида. Овај поступак се понавља за задати број корака. Шематски изглед програма дат је на слици 2-2.



Слика 2-2: Шематски приказ програма за решавање проблема солид - флуид интеракције методом слабог спрезања

Оваква методологија је релативно једноставна за примену, с обзиром да већ постоје програми за решавање проблема струјања флуида и кретања и деформисања солида. Потребно је, дакле, само направити потпрограме који обезбеђују комуникацију постојећих програма. Међутим, решења која се добијају оваквом методом не дају задовољавајућу тачност. Нетачност се јавља због тога што се солид креће без отпора, који физички ипак постоји (вискозни отпор флуида). Стабилност решења у великој мери зависи од величине корака и, генерално, поузданост оваквог решења је прилично дискутабилна.

Јако спрезање (енг. *strong coupling*) је други концепт решавања солид-флуид интеракције методом коначних елемената. Основна идеја јаког спрезања је да се системи једначина солида и флуида споје у заједнички систем. Предност оваквог начина решавања проблема, у односу на слабо спрезање, огледа се у томе што се једначине флуида и солида налазе у заједничком систему једначина, тако да услов конвергенције морају истовремено да задовоље и флуид и солид. За повезивање ова два система једначина постоји више метода: метода Лагранжевих множилаца [2], метода вишеструких ограничења [2], метода коначних елемената са потопљеном границом (*immersed boundary finite element method*) [75], метода коначних елемената са ажурирањем мреже, итд.

У наредном поглављу биће изложени детаљни описи метода јаког спрезања.

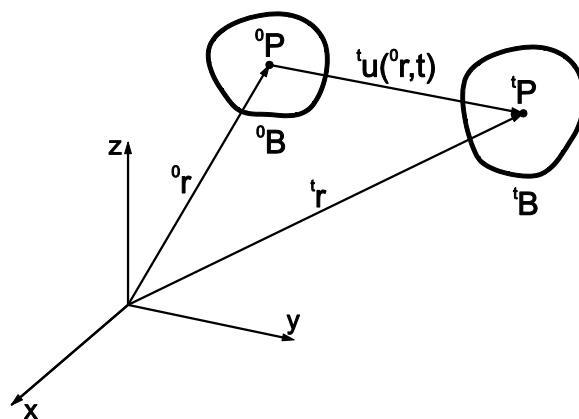
3 Различити концепти у примени јаког спрезања

Као што је напред речено, методе јаког спрезања су могућност решавања солид-флуид интеракције које имају предности у односу на слабо спрезање. У овој глави су дате основне једначине кретања солида и струјања вискозног нестишљивог флуида. Затим су изложене неке од метода јаког спрезања чијом применом се могу повезати једначине солида и флуида, са циљем решавања проблема солид – флуид интеракције.

3.1 Основне једначине кретања флуида и солида и њихова трансформација на дискретизовани облик методом коначних елемената

3.1.1 Лагранжев и Ојлеров опис кретања континуума

У механици солида уобичајено је да се за кретање материјалног система користи Лагранжев опис [43], код кога се физичке величине дефинишу за материјалне тачке које се крећу у простору.

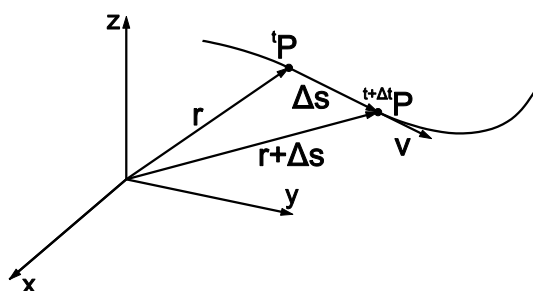


Слика 3-1: Лагранжев опис кретања материјалне тачке

Код Лагранжевог описа брзина промене неке физичке величине $f_M = f_M(t)$, где је М посматрана тачка (а поље је скуп функција за све материјалне тачке М), се дефинише као једноставан извод у времену:

$$\dot{f}_M = \frac{df_M}{dt} \quad (3.1.1)$$

У механици флуида, због великих померања материјалних тачака у току кретања, погодно је користити Ојлеров опис [13], код кога се поље физичке величине дефинише преко фиксних геометријских тачака простора, а материјалне тачке пролазе кроз тај простор, дакле поље физичке величине се дефинише као функција просторних координата x, y, z и времена t : $f(x, y, z, t) = f(\mathbf{r}, t)$, где је \mathbf{r} вектор положаја материјалне тачке (слика 3.2). У овом случају брзина промене неке физичке величине за материјалну тачку се дефинише као тзв. “материјални” извод функције која описује промену те физичке величине.



Слика 3-2: Ојлеров опис кретања материјалне тачке

Објаснимо сада појам материјалног извода. У временском тренутку t вредност физичке величине је $f(\mathbf{r}, t)$, а у временском тренутку $t + \Delta t$ вредност је $f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\Delta t, t + \Delta t)$. Укупна промена физичке величине од тренутка t до $t + \Delta t$ (за посматрану материјалну тачку) је:

$$\Delta f = f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\Delta t, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, t) \quad (3.1.2)$$

Временски извод физичке величине дефинишемо као граничну вредност:

$$\frac{Df}{Dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta f}{\Delta t} \quad (3.1.3)$$

Развојем функције f у Тејлоров ред добијамо:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\Delta t, t + \Delta t) = f(\mathbf{r}, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathbf{r}, t} \Delta t + \left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)_{\mathbf{r}, t} v\Delta t + O(\Delta t^2) \quad (3.1.4)$$

Ако сада заменимо једначину (3.1.4) у (3.1.3) и занемаримо чланове вишег реда, добићемо:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{s}} \quad (3.1.5)$$

Други члан у претходном изразу представља извод функције f у правцу брзине материјалне тачке. Овај извод можемо другачије написати као скаларни производ градијента функције f и јединичног вектора путање честице \mathbf{e}_v :

$$\frac{\partial f}{\partial s} = \mathbf{e}_v \cdot \nabla f \quad (3.1.6)$$

Коначно, добијамо израз који представља материјални извод у Ојлеровој формулацији:

$$\begin{aligned} \frac{Df}{Dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \mathbf{e}_v \cdot \nabla f \\ \frac{Df}{Dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

Дефинишемо сада материјални интеграл неке скаларне функције f , који заузима запремину $V_m(t)$:

$$F(t) = \int_{V_m(t)} f(\mathbf{r}, t) dV \quad (3.1.8)$$

Извод у времену овог интеграла, који се зове материјални извод запреминског интеграла, можемо написати на следећи начин:

$$\frac{dF(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} f(\mathbf{r}, t) dV \quad (3.1.9)$$

Пошто се границе интеграције мењају у времену, временски извод не можемо директно да пренесемо унутар интеграла. Да бисмо решили овај проблем, трансформисаћемо контролну запремину и дати функционал из просторног координатног система у референтни (материјални) координатни систем.

Елементарну запремину у тренутку t можемо да изразимо као функцију елементарне запремине у тренутку t_0 :

$$dV = J dV_0 \quad (3.1.10)$$

У претходној једначини J представља детерминанту Јакобијана трансформације координатног система:

$$J = \det F = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{vmatrix} \quad (3.1.11)$$

где r , s и t представљају осе материјалног координатног система.

Функција f сада може бити написана у зависности од материјалних координата:

$$f(\mathbf{r}, t) = f(\chi(\mathbf{r}), t) \quad (3.1.12)$$

Према томе, интеграл у једначини (3.1.9) можемо изразити у функцији материјалних координата:

$$\frac{dF(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V_0} f(\mathbf{r}, t) dV_0 \quad (3.1.13)$$

Пошто V_0 не зависи од времена, редослед интеграције и извод по времену могу да замене редослед. Такође, материјалне координате не зависе од времена, тако да под интегралом остаје само материјални извод функције f :

$$\frac{dF}{dt} = \int_{V_0} \frac{df(\mathbf{r}, t)}{dt} dV_0 = \int_{V_0} \left\{ \left. \frac{df(\mathbf{r}, t)}{dt} \right|_{\mathbf{r}} J + f(\mathbf{r}, t) \left. \frac{dJ}{dt} \right|_{\mathbf{r}} \right\} dV_0 \quad (3.1.14)$$

Изводи под интегралом су:

$$\left. \frac{df(\mathbf{r}, t)}{dt} \right|_{\mathbf{r}} \frac{Df}{Dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\mathbf{r}} + \mathbf{v} \cdot \nabla f$$

$$\left. \frac{dJ}{dt} \right|_{\mathbf{r}} = \frac{DJ}{Dt} = J(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

Једначину (3.1.13) сада можемо написати у следећем облику:

$$\frac{dF}{dt} = \int_{V_0} \left\{ \frac{df}{dt} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + f (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right\} J dV_0 \quad (3.1.15)$$

или у тренутку t :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} f(\mathbf{r}, t) = \int_{V_m(t)} \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} f) \right\} dV \quad (3.1.16)$$

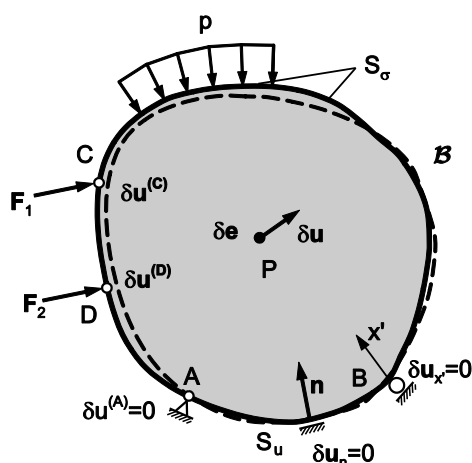
Једначина (3.1.16) представља Рејнолдсову транспортну теорему. Алтернативни облик ове теореме можемо добити применом Гаусове теореме [41]:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} f(\mathbf{r}, t) = \int_{V_m(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{S_m(t)} f(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS \quad (3.1.17)$$

У једначини (3.1.17) запремински интеграл представља промену физичке величине f скупа материјалних тачака унутар контролне запремине (која обухвата тај скуп материјалних тачака), а површински интеграл представља флукс физичке величине кроз површину којом је обухваћена контролна запремина.

3.1.2 Једначине кретања солида

Један од основних принципа у механици континуума је принцип виртуалног рада. Овај принцип се примењује у многим нумеричким програмима као основа за извођење неопходних релација.



Слика 3-3: Шематски приказ деформабилног тела под дејством спољашњих сила [39]

Посматрамо тело у равнотежи са датим граничним условима (Слика 3-3) на које делују задата спољашња оптерећења. Виртуална померања и виртуалне деформације у материјалној тачки су $\delta \mathbf{u}$ и $\delta \mathbf{e}$. Претпоставимо да је поље виртуалних померања $\delta \mathbf{u}$ задато и да су спољашња оптерећења непроменљива. Виртуална померања у тачкама у којима делују спољашње силе су $\delta \mathbf{u}^{(C)}$ и $\delta \mathbf{u}^{(D)}$, а виртуална померања у тачкама ослањања су ограничена. Виртуална померања одговарају равнотежном стању тела под задатим оптерећењима. Напон и померања су задати на површинама S_σ и S_u , респективно. Претпоставка је да су виртуална померања инфинитезимална и да задовољавају задате граничне услове.

Полазећи од равнотежних једначина [39]:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + F_j^V = 0 \quad (3.1.18)$$

и уз примену граничних услова:

$$\sigma_{ij} n_i - F_j^S = 0 \quad (3.1.19)$$

може се доћи до једнакости виртуалних радова унутрашњих и спољашњих сила:

$$\delta W_{\text{int}} = \delta W_{\text{ext}} \quad (3.1.20)$$

где је:

$$\delta W_{\text{int}} = \int_V \sigma_{ij} \delta e_{ij} dV \quad (3.1.21)$$

виртуални рад унутрашњих сила на виртуалним деформацијама, а

$$\delta W_{\text{ext}} = \int_V F_k \delta u_k dV + \int_{S^\sigma} F_k^S \delta u_k^S dV + \sum_i F_k^{(i)} \delta u_k^{(i)}, \quad k = 1, 3, \text{ сабирање по } k \quad (3.1.22)$$

виртуални рад спољашњих сила на виртуалним померањима.

Једначине (3.1.21) и (3.1.22), написане у матричном облику су:

$$\delta W_{\text{int}} = \int_V \delta \mathbf{e}^T \boldsymbol{\sigma} dV \quad (3.1.23)$$

$$\delta W_{\text{ext}} = \int_V \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^V dV + \int_{S^\sigma} \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^S dV + \sum_i \delta \mathbf{u}^T \mathbf{F}^{(i)} \quad (3.1.24)$$

Виртуалне деформације које одговарају виртуалним померањима су:

$$\delta e_{kj} = \frac{1}{2} \left(\delta \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) + \delta \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \right) \quad (3.1.25)$$

У претходним једначинама су: f_k^S и δu_k^S површинска сила и виртуална померања на површини S^σ ; $F_k^{(i)}$ и $\delta u_k^{(i)}$ компоненте концентрисаних сила и виртуална померања материјалних тачака у којима силе делују на тело.

Применом принципа виртуалног рада и конститутивних релација за линеаран еластичан материјал:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} \quad (3.1.26)$$

или, матрично:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \mathbf{e} \quad (3.1.27)$$

и уз примену изопараметарског концепта интерполације [2] унутар коначних елемената, на основу кога су координате и померања у било којој тачки унутар елемента:

$$\mathbf{x} = \mathbf{N} \mathbf{X} \quad (3.1.28)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{N} \mathbf{U} \quad (3.1.29)$$

можемо написати једначину равнотеже коначног елемента, коју овде дајемо без извођења [41]:

$$\mathbf{K} \mathbf{U} = \mathbf{F}_{ext} \quad (3.1.30)$$

где су:

$\mathbf{K} = \int_V \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} dV$ - матрица крутости елемента,

\mathbf{B} - матрица релација деформација – померања у чворовима, која садржи изводе интерполационих функција [2],[39],

\mathbf{C} - еластична конститутивна матрица,

$\mathbf{e} = \mathbf{BU}$ - матрица деформација,

\mathbf{U} - померања у чворовима,

\mathbf{X} - координате чворова,

\mathbf{N} - матрица интерполационих функција,

\mathbf{F}_{ext} - спољашње силе у чворовима елемента.

Једначина (3.1.30) је добијена из принципа виртуалног рада и представља једнакост унутрашњих и спољашњих сила. У општем случају унутрашње силе су нелинеарне функције померања. Линеаризацијом једначину (3.1.30) можемо написати у облику [40], [76] :

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{K}^{(i-1)}\Delta\mathbf{U}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}_{ext} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}_{int}^{(i-1)} \quad (3.1.31)$$

где је:

$\Delta\mathbf{U}^{(i)}$ - вектор прираштаја чворних померања,

${}^{t+\Delta t}\mathbf{F}_{int}^{(i-1)} = \int_V {}^{t+\Delta t}\mathbf{B}^{T(i-1)t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}^{(i-1)}dV$ - вектор унутрашњих сила у последњој познатој

конфигурацији, на крају корака оптерећења (означеног индексом $t + \Delta t$ и у итерацији $i-1$)

Једначине кретања материјалног система могу бити написане применом принципа виртуалног рада [41], уз узимање у обзир дејства инерцијалних сила. Елементарна запреминска инерцијална сила је:

$$d\mathbf{F}^{in} = -\ddot{\mathbf{u}}dm = -\ddot{\mathbf{u}}\rho dV \quad (3.1.32)$$

Дакле, када се узме у обзир утицај инерцијалних сила, виртуални рад спољашњих сила је:

$$\delta W_{ext} = \int_V \delta\mathbf{u}^T (\mathbf{F}^V - \rho\ddot{\mathbf{u}}) dV + \int_{S^\sigma} \delta\mathbf{u}^T \mathbf{F}^S dV + \sum_i \delta\mathbf{u}^T \mathbf{F}^{(i)} \quad (3.1.33)$$

Диференцирањем по времену једначине (3.1.29) добијамо интерполације за брзине и убрзања тачака:

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{N}\dot{\mathbf{U}} \quad (3.1.34)$$

$$\ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{N}\ddot{\mathbf{U}} \quad (3.1.35)$$

где су $\dot{\mathbf{u}}$ и $\ddot{\mathbf{u}}$ брзина и убрзање материјалне тачке у елементу, а $\dot{\mathbf{U}}$ и $\ddot{\mathbf{U}}$ брзине и убрзања у чворовима. Применом израза (3.1.29) за $\delta\mathbf{u}$, једнакост виртуалних радова спољашњих и унутрашњих сила је:

$$\delta\mathbf{U}^T \int_V (\mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} dV) \mathbf{U} + \delta\mathbf{U}^T \int_V (\mathbf{N}^T \rho \mathbf{N} dV) \ddot{\mathbf{U}} = \delta\mathbf{U}^T \mathbf{F} \quad (3.1.36)$$

односно:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + \mathbf{K}\mathbf{U} = \mathbf{F} \quad (3.1.37)$$

Овде је уведена матрица маса коначног елемента:

$$\mathbf{M} = \int_V \mathbf{N}^T \rho \mathbf{N} dV \quad (3.1.38)$$

Једначина (3.1.37) се може, слично као једначина (3.1.31), написати у следећем облику:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + {}^{t+\Delta t} \mathbf{K}^{(i-1)} \Delta \mathbf{U}^{(i)} = {}^{t+\Delta t} \mathbf{F}_{ext} - {}^{t+\Delta t} \mathbf{F}_{int} \quad (3.1.39)$$

У линеарној анализи солида основна претпоставка је да су померања солида инфинитезимално мала и да је материјал линеарно еластичан. Такође, претпоставка је да природа граничних услова остаје непромењена под дејством спољашњих оптерећења. Под овим претпоставкама је изведена једначина равнотеже коначних елемената за статичку анализу (3.1.30). Једначина (3.1.30) се односи на линеарну анализу солида зато што је померање \mathbf{U} линеарна функција спољашњих сила \mathbf{F}_{ext} . У случају када померања нису линеарно зависна од оптерећења, примењује се нелинеарна анализа.

У линеарној анализи, претпоставка да померања морају бити мала примењена је у израчунавању матрица крутости елемената и вектора сила зато што су сви запремински интегрални примењени на оригиналној запремини коначних елемената. Такође, матрица \mathbf{B} , која повезује деформације и чворна померања је константна за сваки елемент и не зависи од померања чворова елемента. Код линеарно еластичног материјала

подразумева се да је конститутивна матрица константна. Непроменљиви гранични услови су такође подразумевани у линеарној анализи.

Проблем кретања деформабилних тела у флуиду је нелинеаран проблем. Нелинеарност је последица великих померања, великих деформација и променљивих граничних услова у солиду услед узајамне интеракције два тела или тела и границе домена флуида (односно зида крвног суда). За моделирање оваквих проблема погодна је користити *Total Lagrangian* формулацију за израчунавање напона и деформација солида. У *Total Lagrangian* формулацији једначина (3.1.39) је [2]:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + \left({}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{K}_L^{(i-1)} + {}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{K}_{NL}^{(i-1)} \right) \Delta \mathbf{U}^{(i)} = {}^{t+\Delta t} \mathbf{F}_{ext} - {}^{t+\Delta t} \mathbf{F}_{int} \quad (3.1.40)$$

где су:

$${}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{K}_L^{(i-1)} = \int_{V_0} {}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{B}_L^T \mathbf{C} {}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{B}_L dV_0 \quad (3.1.41)$$

$${}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{K}_{NL}^{(i-1)} = \int_{V_0} {}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{B}_{NL}^T {}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{S}^{(i-1)} {}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{B}_{NL} dV_0 \quad (3.1.42)$$

$${}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{F} = \int_{V_0} {}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{B}_L^T {}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{S}^{(i-1)} dV_0 \quad (3.1.43)$$

линеарни и нелинеарни део матрице крутости и вектор унутрашњих сила, респективно.

Матрице и вектори у једначинама (3.1.41), (3.1.42) и (3.1.43) су:

${}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{B}_L^T$ – линеарна матрица везе деформације – померања,

${}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{B}_{NL}^T$ – геометријски нелинеарна матрица везе деформације – померања,

${}_0 \mathbf{C}$ – конститутивна матрица,

${}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{S}^{(i-1)}$, ${}^{t+\Delta t}_0 \mathbf{S}^{(i-1)}$ – матрица и вектор Пиола – Кирхофовог напона друге врсте

Детаљи око рачунања појединих матрица и вектора у *Total Lagrangian* формулацији дати су у Додатку А.

С обзиром на то да се струјање флуида описује Навије – Стоксовом једначином [39], [14], [41], у којој су непозната поља брзина и притисака, погодна је да и једначину

кретања солида трансформишемо тако да непозната буде поље брзина. За ову трансформацију једначине (3.1.37) потребне су одређене апроксимације. Сматрамо да је убрзање у временском кораку константно, и да се може изразити као прираштај брзине у текућем временском кораку:

$${}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}}^{(i)} = \frac{{}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{U}}^{(i)} - {}^t\dot{\mathbf{U}}}{\Delta t} \quad (3.1.44)$$

Прираштај померања можемо да изразимо као производ прираштаја брзине у кораку и дужине текућег корака:

$$\Delta \mathbf{U}^{(i)} = \Delta \dot{\mathbf{U}}^{(i)} \cdot \Delta t \quad (3.1.45)$$

Ако сада заменимо једначине (3.1.44) и (3.1.45) у једначину (3.1.39) добићемо:

$$\mathbf{M} \frac{{}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{U}}^{(i)} - {}^t\dot{\mathbf{U}}}{\Delta t} + {}^{t+\Delta t}\mathbf{K}^{(i-1)} \Delta \dot{\mathbf{U}}^{(i)} \Delta t = {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}_{ext} - \mathbf{F}_{int}^{(i-1)} \quad (3.1.46)$$

Брзину у текућој итерацији можемо другачије да напишемо као збир брзине из претходне итерације и текућег прираштаја брзине:

$${}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{U}}^i = {}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{U}}^{i-1} + \Delta \dot{\mathbf{U}}^i \quad (3.1.47)$$

тако да сада једначина (3.1.46) има облик:

$$\mathbf{M} \frac{{}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{U}}^{(i-1)} + \Delta \dot{\mathbf{U}}^{(i)} - {}^t\dot{\mathbf{U}}}{\Delta t} + {}^{t+\Delta t}\mathbf{K}^{(i-1)} \Delta \dot{\mathbf{U}}^i \Delta t = {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}_{ext} - \mathbf{F}_{int}^{(i-1)} \quad (3.1.48)$$

Ако све чланове који су познати пребацимо на десну страну једначине, а на левој страни групишемо матрице које множе вектор непознатих прираштаја брзина $\Delta \dot{\mathbf{U}}^i$, добићемо коначан облик дискретизоване једначине кретања солида:

$$\left(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + {}^{t+\Delta t}\mathbf{K}^{(i-1)} \Delta t \right) \Delta \dot{\mathbf{U}}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}_{ext} - \mathbf{F}_{int}^{(i-1)} - \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \left({}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{U}}^{(i-1)} - {}^t\dot{\mathbf{U}} \right) \quad (3.1.49)$$

3.1.3 Једначине струјања флуида

Једначине баланса флуида се изводе коришћењем Ојлеровог описа. Ламинарно струјање вискозног флуида описује се Навије-Стоксовом једначином, која се добија из баланса количине кретања.

Изведимо прво једначину континуитета која представља баланс масе флуида. Посматрамо елементарну масу dm која у тачки простора испуњава елементарну запремину dV :

$$dm = \rho dV \quad (3.1.50)$$

где је $\rho(x_i, t)$ густина флуида. Маса m у запремини dV је:

$$m = \int_V \rho dV \quad (3.1.51)$$

Једначина баланса се изражава условом:

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (3.1.52)$$

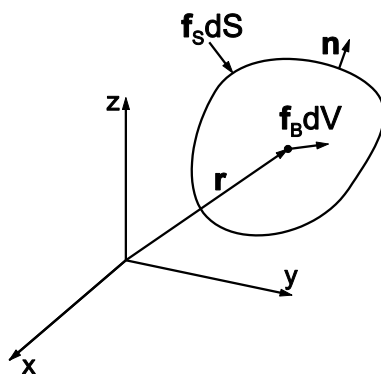
Ако применимо дефиницију материјалног извода (3.1.7) на једначину (3.1.52) добићемо:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{D}{Dt} \int_V \rho dV = \int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right) \right) dV = 0 \quad (3.1.53)$$

С обзиром на то да је запремина произвољна, једначину континуитета у тачки можемо написати у следећем облику:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (3.1.54)$$

Изведимо сада једначину која описује ламинарно струјање вискозног нестишљивог флуида. Посматрајмо елементарну запремину флуида dV , на коју делују спољашња запремнска сила f_B и спољашња површинска сила f_S на граници dS (Слика 3-4).



Слика 3-4: Елементарна запремина флуида

Једначина промене момента количине кретања за посматрану запремину је:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV = \int_V \mathbf{f}_B dV + \int_S \mathbf{f}_S dS \quad (3.1.55)$$

Ако заменимо једначину одржања масе (3.1.53) у једначину (3.1.55) добићемо:

$$\int_V \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} dV = \int_V \mathbf{f}_B dV + \int_S \mathbf{f}_S dS \quad (3.1.56)$$

На основу Кошијеве теореме и Гаусове теореме о претварању површинског у запремински интеграл, уз коришћење једначине $f_{Sj} = \sigma_{ij} n_i$, за нестишљив флуид добијамо (у компонентном облику):

$$\int_V \rho \frac{Dv_i}{Dt} dV = \int_V f_i^B dV + \int_V \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dV \quad (3.1.57)$$

Конститутивна релација за Њутнов флуид има следећи облик:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (3.1.58)$$

где су: p - притисак флуида, δ_{ij} - Кронекеров делта симбол ($= 0$ за $i \neq j$; $= 1$ за $i = j$),

τ - вискозни напон. Вискозни напон је пропорционалан брзини деформације:

$$\tau_{ij} = 2\mu \dot{e}_{ij} \quad (3.1.59)$$

У претходној једначини са \dot{e}_{ij} означена брзина деформације флуида:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.1.60)$$

Када се једначине (3.1.58) и (3.1.59) замене у једначину (3.1.57), добија се:

$$\int_V \rho \frac{Dv_i}{Dt} dV = \int_V f_i^B dV + \int_V \left(-\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial^2 v_j}{\partial x_j \partial x_i} \right) \right) dV. \quad (3.1.61)$$

У претходној једначини подразумева се сабирање по поновљеном индексу j .

Како је запремина V произвољна, може се написати диференцијални облик претходне једначине:

$$\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial^2 v_j}{\partial x_j \partial x_i} \right) + f_i^B \quad (3.1.62)$$

Једначина (3.1.62) представља Навије-Стоксову једначину за нестишљиво вискозно струјање. Из једначине континуитета следи да је други члан у загради на десној страни једначине једнак нули, па је коначан облик Навије Стоксове једначине:

$$\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} + f_i^B \quad (3.1.63)$$

3.1.3.1 Дискретизација Навије-Стоксове једначине методом коначних елемената

Флуидни домен се дискретизује мрежом коначних елемената који су фиксирани у простору у току посматраног периода кретања. Усвајамо следећу интерполацију за брзину у некој тачки:

$$\mathbf{v} = \mathbf{N}\mathbf{V}, \text{ или } v_i = N_K V_i^K \quad (3.1.64)$$

при чему се подразумева сабирање по поновљеном индексу K . У претходној једначини $N_K(r, s, t)$ су интерполационе функције, које се користе за интерполацију геометрије и интерполацију брзина, а \mathbf{V} је вектор чворних брзина. Притисак се такође интерполира унутар елемента:

$$\mathbf{p} = \hat{\mathbf{N}}\mathbf{P} \quad (3.1.65)$$

Или:

$$p = \hat{N}_K p^K, \text{ сабирање по } K. \quad (3.1.66)$$

Применимо сада Галеркинов метод [41], [3] за приближно решавање диференцијалних једначина на Навије-Стоксову једначину:

$$\int_V N_K \rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} v_j \right) dV = - \int_V N_K \frac{\partial p}{\partial x_i} dV + \int_V N_K \mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} dV + \int_V N_K f_i^B \quad (3.1.67)$$

Применом Гаусове теореме на прва два члана на десној страни једначине добијамо:

$$\int_V N_K \frac{\partial p}{\partial x_i} dV = \int_V \frac{\partial (N_K p)}{\partial x_i} dV - \int_V \frac{\partial N_K}{\partial x_i} p dV = \int_S N_K p n_i dS - \int_V \frac{\partial N_K}{\partial x_i} p dV \quad (3.1.68)$$

$$\begin{aligned} \int_V \mu N_K \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} dV &= \int_V \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(N_K \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) dV - \int_V \mu \frac{N_K}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dV = \\ &= \int_S \mu N_K \frac{\partial v_i}{\partial x_j} n_j dS - \int_V \mu \frac{N_K}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dV \end{aligned} \quad (3.1.69)$$

Заменом једначина (3.1.68) и (3.1.69) у једначину (3.1.67) добијамо:

$$\begin{aligned} \int_V \rho N_K \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} v_j \right) + \int_V \mu \frac{N_K}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dV - \int_V \frac{\partial N_K}{\partial x_i} p dV = \\ - \int_S N_K p n_i dS + \int_S \mu N_K \frac{\partial v_i}{\partial x_j} n_j dS + \int_V N_K f_i^B \end{aligned} \quad (3.1.70)$$

Претходну једначину можемо написати у матричном облику, уз примену једначина (3.1.64) и (3.1.66):

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{V}} + (\mathbf{K}_{vv} + \mathbf{K}_\mu)\mathbf{V} + \mathbf{K}_{vp}\mathbf{P} = \mathbf{F}_v \quad (3.1.71)$$

Где су матрице и вектори у компонентном облику:

$$[M_{KJ}]_i = \int_V \rho N_K N_J dV \quad (3.1.72)$$

$$[(K_{vv})_{KJ}]_i = \int_V \rho N_K N_{J,j} dV \quad (3.1.73)$$

$$\left[(K_\mu)_{KJ} \right]_i = \int_V \mu N_{K,j} N_{J,j} dV \quad (3.1.74)$$

$$\left[(K_{vp})_{KJ} \right]_i = - \int_V N_{K,i} \hat{N}_J dV \quad (3.1.75)$$

$$\left[(F_v)_K \right]_i = \int_V N_K f_i^B dV + \int_S N_K (-p \delta_{ij} + \mu v_{i,j}) n_j dS \quad (3.1.76)$$

Систем једначина (3.1.71) представља систем једначина коначних елемената који се сабира на уобичајени начин да би се добиле једначине система. На овај систем једначина примењује се уобичајена инкрементално-итеративна шема. Убрзање можемо да изразимо преко брзина на почетку и на крају корака:

$$\dot{\mathbf{V}} = \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{V}^{n+1} - \mathbf{V}^n) \quad (3.1.77)$$

Затим, брзине и притиске у текућој итерацији можемо да напишемо као збир вредности из претходне итерације и прираштаја у текућој итерацији:

$$\mathbf{V}^i = \mathbf{V}^{i-1} + \Delta \mathbf{V}^i \quad (3.1.78)$$

$$\mathbf{P}^i = \mathbf{P}^{i-1} + \Delta \mathbf{P}^i \quad (3.1.79)$$

Када једначине (3.1.77) и (3.1.79) заменимо у систем једначина (3.1.71) добићемо коначан облик дискретизоване Навије – Стоксове једначине [39]:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M} + {}^{n+1} \hat{\mathbf{K}}_{vv}^{i-1} & \mathbf{K}_{vp} \\ \mathbf{K}_{vp}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{V}^i \\ \Delta \mathbf{P}^i \end{Bmatrix} = \\ & \begin{Bmatrix} {}^{n+1} \mathbf{F}_{ext}^{i-1} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M} + {}^{n+1} \mathbf{K}_{vv}^{i-1} & \mathbf{K}_{vp} \\ \mathbf{K}_{vp}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} {}^{n+1} \mathbf{V}^{i-1} \\ {}^{n+1} \mathbf{P}^{i-1} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}^n \mathbf{V} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (3.1.80)$$

Где су:

$$\left[({}^{n+1} \hat{\mathbf{K}}_{vv}^{(i-1)})_{KJ} \right]_{ik} = \left[{}^{n+1} \mathbf{K}_{KJ}^{(i-1)} \right]_{ii} + \left[{}^{n+1} \mathbf{J}_{KJ}^{(i-1)} \right]_{ik} \quad (3.1.81)$$

$$\left[{}^{n+1} \mathbf{J}_{KJ}^{(i-1)} \right]_{ik} = \rho \int_V N_K {}^{n+1} v_{i,k}^{(i-1)} N_J dV \quad (3.1.82)$$

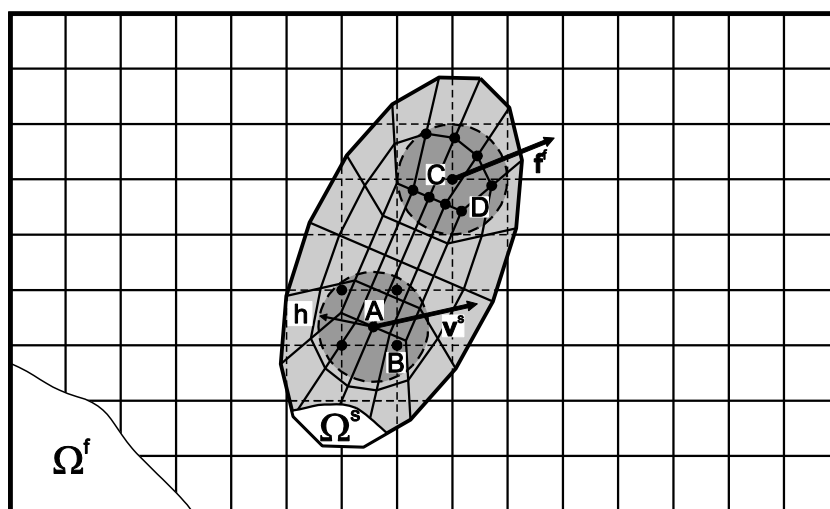
Програм ПАКФ који се користи у овом раду као део солвера PAKSF користи описану мешовиту формулацију (решава се по брзинама и притисцима као непознатим) и претпоставку да је притисак константан унутар коначног елемента, тј. имамо за сваки елемент једну величину притиска као променљиву).

У наставку ће бити дати детаљи о појединим методама које се користе за спрезање једначина солида и флуида у заједнички систем.

3.2 Ојлерова формулација

Домени флуида и солида су шематски приказани на слици 3-5. Дакле, имамо следеће домене:

1. Домен флуида, који окружује домен солида Ω^f
2. Домен солида Ω^s
3. Укупни домен флуида $\Omega = \Omega^f \cup \Omega^s$ (3.2.1)



Слика 3-5: Шематски приказ методе директног спрезања

3.2.1 Основни концепт

Основна идеја је да се интегрише домен солида и домен флуида коришћењем мреже флуида. За оба домена, солид и флуид, користи се Ојлерова формулација материјалног извода.

Основне једначине за флуид укључују Навије-Стоксову једначину и једначину континуитета. Оне се примењују на домен флуида, који укључује и Гаусове тачке пресечених елемената флуида, које се налазе ван границе домена солида.

Основна једначина за солид је једначина баланса сила, која укључује Хуков закон еластичности. Оне се користе за елементе солида (односно, неактивни елементи флуида) као и за Гаусове тачке пресечених елемената које су прекривене солидом.

Степени слободе су брзине у чворовима мреже флуида и притисци у елементима флуида (један степен слободе за притисак у елементу флуида). Поље померања солида је мапирано на мрежу флуида за текући временски корак, и користи се за израчунавање деформација и напона у мрежи флуида.

3.2.2 Основне једначине за солид

Основна једначина за солид је равнотежна једначина:

$$\rho^s \dot{v}_i^s = \sigma_{ij,j}^s + f_i^{Vs} \quad (3.2.2)$$

Даље ћемо користити нотацију $v_i \equiv v_i^s$. У Ојлеровој формулацији извод брзине је:

$$\dot{v}_i = \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \quad (3.2.3)$$

Слаба форма једначине баланса (3.2.2) је:

$$\int_V N_I \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) dV = \int_V N_I \sigma_{ij,j}^s dV + \int_V N_I f_i^{Vs} dV \quad (3.2.4)$$

Члан који садржи напон се може трансформисати на следећи начин:

$$\begin{aligned} \int_V N_I \sigma_{ij,j}^s dV &= \int_V (N_I \sigma_{ij}^s)_{,j} dV - \int_V N_{I,j} \sigma_{ij}^s dV = \\ &= \int_S N_I \sigma_{ij}^s n_j dS - \int_V N_{I,j} \sigma_{ij}^s dV \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

где се сумирањем површински интегрални поништавају.

Коришћењем инкременталне форме добијамо:

$$\int_V N_{I,j} \sigma_{ij}^s dV = \int_V N_{I,j}{}^n \sigma_{ij}^s dV + \int_V N_{I,j} \Delta \sigma_{ij}^s dV \quad (3.2.6)$$

За дводимензионални проблем имамо:

$$\begin{aligned} i = 1(x): \quad N_{I,j}{}^n \sigma_{1j}^s &= N_{I,x}{}^n \sigma_{xx}^s + N_{I,y}{}^n \sigma_{xy}^s \\ i = 2(y) \quad N_{I,j}{}^n \sigma_{2j}^s &= N_{I,x}{}^n \sigma_{xy}^s + N_{I,y}{}^n \sigma_{yy}^s \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

Исте релације задржавамо и за инкременте напона:

$$i = 1(x): N_{I,j} \Delta \sigma_{1j}^s = (N_{I,x} C_{1k} + N_{I,y} C_{3k}) \Delta e_k = (N_{I,x} C_{1k} + N_{I,y} C_{3k}) B_{kJ} \Delta U^J \quad (3.2.8)$$

$$i = 2(y): N_{I,j} \Delta \sigma_{2j}^s = (N_{I,x} C_{3k} + N_{I,y} C_{2k}) \Delta e_k = (N_{I,x} C_{3k} + N_{I,y} C_{2k}) B_{kJ} \Delta U^J \quad (3.2.9)$$

где је, за четворочворни 2Д елемент:

$$\Delta \mathbf{U}^T = [\Delta U_x^1 \Delta U_y^1 \dots \Delta U_x^4 \Delta U_y^4] \quad (3.2.10)$$

и:

$$\begin{bmatrix} \Delta \sigma_{xx} \\ \Delta \sigma_{yy} \\ \Delta \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \mathbf{C} \begin{bmatrix} \Delta e_{xx} \\ \Delta e_{yy} \\ \Delta e_{xy} \end{bmatrix} \quad (3.2.11)$$

Такође, прираштај деформација је:

$$\Delta e_k = B_{kJ} \Delta U^J \quad (3.2.12)$$

Даље, можемо писати:

$$\Delta U^J = ({}^n V^J + \Delta V^J) \Delta t \quad (3.2.13)$$

Коришћењем једначина (3.2.5) - (3.2.12), једначина (3.2.4) може бити написана у облику:

$$\left(\frac{1}{\Delta t} M_{IJ} + (\tilde{K}_{IJ}^{vv} + \Delta t K_{IJ}^{ss}) \right) \Delta V^J = F_I^{ext} - F_I^{int} - \left(\frac{1}{\Delta t} M_{IJ} + (K_{IJ}^{vv} + \Delta t K_{IJ}^{ss}) \right) V^J \quad (3.2.14)$$

Овде је матрица маса:

$$\mathbf{M} = \hat{\mathbf{N}}^T \hat{\mathbf{N}} \quad (3.2.15)$$

где је:

$$\hat{\mathbf{N}}^I = \begin{bmatrix} N_I N_1 & 0 & N_I N_2 & 0 & N_I N_3 & 0 & N_I N_4 & 0 \\ 0 & N_I N_1 & 0 & N_I N_2 & 0 & N_I N_3 & 0 & N_I N_4 \end{bmatrix} \quad (3.2.16)$$

Матрица \tilde{K}_{kJ}^{vv} је дата у једначини (3.2.14):

$$\begin{aligned} \left[{}^{n+1}(\tilde{\mathbf{K}}_{wv}^{(i-1)})_{KJ} \right]_{ik} &= \left[{}^{n+1}\mathbf{K}_{KJ}^{(i-1)} \right]_{ii} + \left[{}^{n+1}\mathbf{J}_{KJ}^{(i-1)} \right]_{ik} \\ \left[{}^{n+1}\mathbf{J}_{KJ}^{(i-1)} \right]_{ik} &= \rho^s \int_V N_K {}^{n+1}v_{i,k}^{(i-1)} N_J dV \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

За чвор I , компоненте матрице K_{IJ}^{ss} су:

$$\begin{aligned} (x): \quad & \int_V (N_{I,x} C_{1k} + N_{I,y} C_{3k}) B_{kj} dV \\ (y): \quad & \int_V (N_{I,x} C_{3k} + N_{I,y} C_{2k}) B_{kj} dV \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

Сила F_I^{int} за правце (x) и (y) је:

$$\begin{aligned} (x): \quad & F_{Ix}^{\text{int}} = \int_V (N_{I,x} {}^n\sigma_{xx}^s + N_{I,y} {}^n\sigma_{xy}^s) dV \\ (y): \quad & F_{Iy}^{\text{int}} = \int_V (N_{I,x} {}^n\sigma_{xy}^s + N_{I,y} {}^n\sigma_{yy}^s) dV \end{aligned} \quad (3.2.19)$$

3.2.3 Кораци у прорачуну

Прорачун се обавља на следећи начин:

1. За текући временски корак израчунају се инкременти и укупне брзине у чворовима флуида из једначина баланса коначних елемената. Непознате вредности такође укључују притиске у елементима флуида који нису прекривени доменом солида.
2. Израчунају се померања у чворовима мреже флуида, који нису прекривени солидом.
3. Мапира се поље померања на мрежи солида, помери се солид, и затим се мапирају померања у чворовима флуида који су прекривени солидом (нови положај солида).
4. Поновити кораке 1 до 3.

3.3 Примена Лагранжевих множилаца

3.3.1 Варијациони принцип

Овде користимо Галеркинову слабу форму за ограничене проблеме [49]. За континуум, ово можемо написати као:

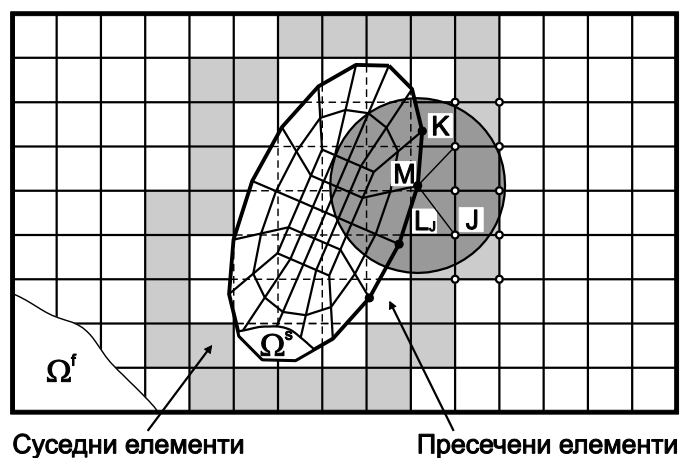
$$-\int_V \rho \delta \mathbf{u}^T \ddot{\mathbf{u}} dV + \int_V \delta \mathbf{e}^T \mathbf{C} \mathbf{e} dV - \int_V \delta \mathbf{u}^T \mathbf{f}^V dV - \int_S \delta \mathbf{u}^T \mathbf{t}^S dS - \int_V \delta \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{C}_u dV + \int_V \delta \mathbf{C}_u^T \boldsymbol{\lambda} dV = 0 \quad (3.3.1)$$

где први члан представља варијацију рада инерцијалних сила, други члан је варијација енергије деформације, трећи члан је виртуални рад спољашњих запреминских сила, четврти члан је виртуални рад спољашњих сила на граници домена S , а последња два члана су варијација ограничења $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{C}_u = 0$. Овде користимо релацију $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{C}_u = \mathbf{C}_u^T \boldsymbol{\lambda}$ која следи из дефиниције Лагранжевих множилаца. Величине у једначини (3.3.1) су: \mathbf{u} - померање у материјалној тачки, \mathbf{f}^V - вектор запреминских сила, \mathbf{e} - деформација, \mathbf{C} - конститутивни тензор, \mathbf{t}^S - вектор површинског напона, $\boldsymbol{\lambda}$ - вектор Лагранжевих множилаца и $\mathbf{C}_u = \mathbf{0}$ - вектор ограничења.

Прва четири члана у једначини (3.3.1) представљају једначину баланса. Даље ћемо анализирати чланове који се односе на Лагранжеве множиоце.

3.3.2 Ограничења чворова солида који се налазе на спољашњој граници

Посматрајмо тачку M на граници солида (Слика 3-6):



Слика 3-6: Примена Лагранжевих множилаца на чворове на граници солида

Ограничење које треба да буде задовољено је:

$$f_M = \int_V (V_M^2 - v_M^f) dV = 0 \quad (3.3.2)$$

где је V_M - интензитет брзине чворова који се налазе на граници солида, а v_M^f - интензитет брзине у просторној тачки М. Квадрати интензитета ове две брзине су:

$$V_M^2 = V_{Mx}^2 + V_{My}^2 + V_{Mz}^2 = \sum_i V_{Mi}^2 \quad (3.3.3)$$

и

$$v_{fM}^2 = v_{fMx}^2 + v_{fMy}^2 + v_{fMz}^2 = \sum_i v_{fMi}^2 \quad (3.3.4)$$

Варијације инкремената V_M^2 и v_{fM}^2 су:

$$\delta V_M^2 = 2 \sum_i V_{Mi} \delta V_{Mi}, \quad \Delta V_M^2 = 2 \sum_i V_{Mi} \Delta V_{Mi} \quad (3.3.5)$$

$$\delta v_{fM}^2 = 2 \sum_i v_{fMi} \delta v_{fMi}, \quad \Delta v_{fM}^2 = 2 \sum_i v_{fMi} \Delta v_{fMi} \quad (3.3.6)$$

Компоненте брзина флуида изражавамо као функцију брзина у чворовима околних елемената флуида који се налазе у околини посматране тачке. Околни елементи су они који имају заједничку страну или заједнички чвор са елементима флуида које сече контура солида. Усвајамо апроксимацију за брзину флуида која се поклапа са тачком М на контури солида:

$$v_{fMi} = \sum_I c_I V_i^I \quad (3.3.7)$$

где су c_I интерполационе функције (коэффициенти интерполације). Сада ћемо написати израз за чланове који одговарају варијацији ограничења у једначини (3.3.1) који одговара чвору М солида:

$$\begin{aligned} \delta \lambda_M f_M + \delta f_M \lambda_M &= \delta \lambda_M \left({}^n f_M + \Delta f_M \right) + \delta f_M \left({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M \right) = \\ &= \delta \lambda_M \left({}^n f_M + 2 \sum_i {}^n V_{Mi} \Delta V_{Mi} - 2 \sum_i {}^n v_{fMi} \Delta v_{fMi} \right) + \\ &+ \left(2 \sum_i {}^n V_{Mi} \delta V_{Mi} - 2 \sum_i {}^n v_{fMi} \delta v_{fMi} \right) \left({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M \right) \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

где леви горњи индекс n одговара почетку временског корака (или последњој итерацији).

Размотримо детаље у једначини (3.3.8) (користимо координату $i=1$ тј. x и једначину (3.3.7)):

$$\text{за } \delta\lambda_M : \quad 2 {}^n V_{Mx} \Delta V_{Mx} - 2 {}^n v_{fMx} \sum_I c_I \Delta V_x^I \quad (3.3.9)$$

$$\text{за } \delta V_{Mx} : \quad \delta V_{Mx} \times 2 V_{Mx} ({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M) \quad (3.3.10)$$

$$\text{за } \delta v_{fMx} : \quad \delta v_{fMx} \times 2 v_{fMx} ({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M) = \delta V_x^I \times 2 c^I v_{fMx} ({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M) \text{ сума по } I \quad (3.3.11)$$

Сада имамо следеће коефицијенте за матрицу и вектор сила у интегралу по запремини елемента коме тачка M припада:

$$\text{Једначина за } \lambda_M : \quad K_{\lambda Mi} = 2 {}^n V_{Mi}, \quad K_{\lambda li} = -2 {}^n v_{fMi} c_I, \quad K_{\lambda \lambda} = 0 \quad (3.3.12)$$

$$F_\lambda = - {}^n f_M \quad (3.3.13)$$

Једначина за солид Mi ($i=1,2,3$):

$$K_{Mi\lambda} = K_{\lambda Mi} = 2 {}^n V_{Mi} \quad (3.3.14)$$

$$F_{Mi}^\lambda = - K_{Mi\lambda} {}^n \lambda \quad (3.3.15)$$

Једначина за флуид V_{li} ($i=1,2,3$):

$$K_{li\lambda} = K_{\lambda li} = -2 {}^n v_{fMi} c_I \quad (3.3.16)$$

$$F_{li}^\lambda = - K_{li\lambda} {}^n \lambda \quad (3.3.17)$$

3.3.3 Интерполација брзина

Брзине на контури солида се интерполирају на следећи начин. Прво израчунавамо коефицијенте:

$$\bar{c}_1 = \frac{L_1}{L}, \bar{c}_2 = \frac{L_2}{L}, \bar{c}_3 = \frac{L_3}{L}, \dots, \bar{c}_n = \frac{L_n}{L} \quad (3.3.18)$$

где је:

$$L = L_1 + L_2 + \dots + L_n \quad (3.3.19)$$

Растојања L_1, L_2, \dots, L_n између контурног чвора солида и чворова у мрежи флуида су приказана на слици 3-6. Даље, израчунавамо коефицијент \bar{a} :

$$\bar{a} = \frac{1}{c_1} + \frac{1}{c_2} + \frac{1}{c_3} \dots + \frac{1}{c_n} \quad (3.3.20)$$

а затим коефицијенте:

$$c_1 = \frac{1}{c_1 \bar{a}}, c_2 = \frac{1}{c_2 \bar{a}}, c_3 = \frac{1}{c_3 \bar{a}}, \dots, c_n = \frac{1}{c_n \bar{a}} \quad (3.3.21)$$

или

$$c_1 = \frac{1}{L_1 a}, c_2 = \frac{1}{L_2 a}, c_3 = \frac{1}{L_3 a}, \dots, c_n = \frac{1}{L_n a} \quad (3.3.22)$$

где је

$$a = \frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} + \dots + \frac{1}{L_n} \quad (3.3.23)$$

Може се приметити да је задовољена релација:

$$c_1 + c_2 + c_3 + \dots + c_n = 1 \quad (3.3.24)$$

Из претходних једначина се види да је брзина V_M обрнуто пропорционална растојањима чворова солида од чворова мреже флуида. У случају када се чвор солида поклапа (унутар нумеричке толеранције) са неким од чворова флуида, имамо да је:

$$c_1 = 1, c_2 = c_3 = \dots = c_n = 0 \quad (3.3.25)$$

3.3.4 Ограничења чворова на граници солида – алтернативна формулација

Ограничење које треба да буде задовољено је:

$$f_M = \int_V \sum_i (V_{Mi} - v_{Mi}^f)^2 dV = 0 \quad (3.3.26)$$

где је V_M интензитет брзине контурног чвора солида, а v_M^f је интензитет брзине просторне тачке М.

Варијације f_M и инкремента Δf_M су:

$$\delta f_M = 2 \sum_i (V_{Mi} - v_{Mi}^f) \delta (V_{Mi} - v_{Mi}^f) \quad (3.3.27)$$

$$\Delta f_M = 2 \sum_i (V_{Mi} - v_{Mi}^f) \Delta (V_{Mi} - v_{Mi}^f) \quad (3.3.28)$$

Компоненте брзина флуида изражавамо као функцију брзина у чворовима околних елемената флуида који се налазе у околини посматране тачке. Околни елементи су они који имају заједничку страницу или заједнички чвор са пресеченим елементима које сече контура солида. Дакле, имамо:

$$v_{fMi} = \sum_I c_I V_i^I \quad (3.3.29)$$

Сада ћемо написати израз за чланове који одговарају варијацији ограничења у једначини (3.3.1), који одговара чвору М солида:

$$\begin{aligned} \delta \lambda_M f_M + \delta f_M \lambda_M &= \delta \lambda_M ({}^n f_M + \Delta f_M) + \delta f_M ({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M) = \\ \delta \lambda_M \left({}^n f_M + 2 \sum_i ({}^n V_{Mi} - {}^n v_{Mi}^f) \Delta V_{Mi} - 2 \sum_i ({}^n V_{Mi} - {}^n v_{Mi}^f) \Delta v_{fMi} \right) &+ \\ \left(\sum_i ({}^n V_{Mi} - {}^n v_{Mi}^f) \delta V_{Mi} - 2 \sum_i ({}^n V_{Mi} - {}^n v_{Mi}^f) \delta v_{Mi}^f \right) &\left({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M \right) \end{aligned} \quad (3.3.30)$$

где леви горњи индекс n одговара почетку временског корака (или последњој итерацији).

Размотримо детаље у једначини (3.3.30) (користимо координату $i=1$ тј. x и једначину (3.3.29)):

$$\text{за } \delta \lambda_M : \quad 2 ({}^n V_{Mx} - {}^n v_{Mx}^f) \Delta V_{Mx} - 2 ({}^n V_{Mx} - {}^n v_{Mx}^f) \sum_I c_I \Delta V_x^I \quad (3.3.31)$$

$$\text{за } \delta V_{Mx} : \quad \delta V_{Mx} \times 2 ({}^n V_{Mx} - {}^n v_{Mx}^f) ({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M) \quad (3.3.32)$$

$$\begin{aligned} \text{за } \delta v_{Mx}^f : \quad \delta v_{fMx} \times 2 ({}^n V_{Mx} - {}^n v_{Mx}^f) ({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M) &= \\ \delta V_x^I \times 2 c^I ({}^n V_{Mx} - {}^n v_{Mx}^f) ({}^n \lambda_M + \Delta \lambda_M) &\quad \text{сума по } I \end{aligned} \quad (3.3.33)$$

Сада имамо следеће коефицијенте за матрицу и вектор сила у интегралу по запремини елемента коме тачка М припада:

Једначина за λ_M :

$$K_{\lambda M i} = 2 \left({}^n V_{M i} - {}^n v_{M i}^f \right), K_{\lambda i i} = -2 \left({}^n V_{M i} - {}^n v_{M i}^f \right) c_I, K_{\lambda \lambda} = 0 \quad (3.3.34)$$

$$F_{\lambda} = - {}^n f_M \quad (3.3.35)$$

Једначина за солид M_i ($i=1,2,3$):

$$K_{M i \lambda} = K_{\lambda M i} = 2 \left({}^n V_{M i} - {}^n v_{M i}^f \right) \quad (3.3.36)$$

$$F_{M i}^{\lambda} = - K_{M i \lambda} {}^n \lambda \quad (3.3.37)$$

Једначина за флуид V_i ($i=1,2,3$):

$$K_{i i \lambda} = K_{\lambda i i} = -2 \left({}^n V_{M i} - {}^n v_{M i}^f \right) c_I \quad (3.3.38)$$

$$F_{i i}^{\lambda} = - K_{i i \lambda} {}^n \lambda \quad (3.3.39)$$

3.4 Примена методологије вишеструких ограничења ("Multipoint Constraints")

3.4.1 Интерполација брзина за чворове на граници флуида

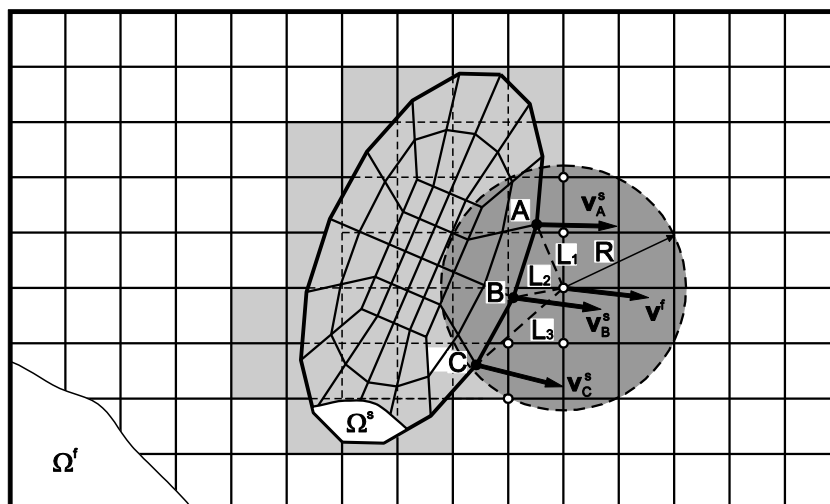
Брзине на контури флуида која окружује солид (слика 3-7), а која представља границу између домена флуида и домена солида, се интерполирају слично као и у претходно приказаној методи Лагранжевих множилаца. Прво израчунавамо коефицијенте:

$$k_1 = \frac{L_1}{L}, k_2 = \frac{L_2}{L}, k_3 = \frac{L_3}{L}, \dots, k_n = \frac{L_n}{L} \quad (3.4.1)$$

где је:

$$L = L_1 + L_2 + \dots + L_n \quad (3.4.2)$$

Растојања L_1, L_2, \dots, L_n између чворова флуида са контуре флуида и чворова са контуре солида А, В, С... (Слика 3-7). Ти чворови се налазе унутар изабраног домена R и претпоставка је да их има n .



Слика 3-7: Шематски приказ интерполације брзина за тачку на контури флуида

Даље, израчунавамо коефицијент a :

$$a = \frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_2} + \frac{1}{k_3} \dots + \frac{1}{k_n} \quad (3.4.3)$$

а затим коефицијенте:

$$\bar{k}_1 = \frac{1}{k_1 a}, \bar{k}_2 = \frac{1}{k_2 a}, \bar{k}_3 = \frac{1}{k_3 a}, \dots, \bar{k}_n = \frac{1}{k_n a} \quad (3.4.4)$$

Може се приметити да је следећа релација задовољена:

$$\bar{k}_1 + \bar{k}_2 + \bar{k}_3 + \dots + \bar{k}_n = 1 \quad (3.4.5)$$

Брзина \mathbf{v}^f у чвору флуида се добија интерполацијом:

$$\mathbf{v}^f = \sum_{J=1}^n \bar{k}_J \mathbf{v}_J^s \quad (3.4.6)$$

где су \mathbf{v}_J^s , $J = 1 \dots n$ брзине на контури солида.

Приметимо да је брзина \mathbf{v}^f обрнуто пропорционална растојању чвора флуида од чворова на контури солида. У случају када се чвор флуида поклапа са тачком на контури солида (унутар нумеричке толеранције), тада имамо да је:

$$\bar{k}_1 = 1, \bar{k}_2 = \bar{k}_3 = \dots = \bar{k}_n = 0 \quad (3.4.7)$$

и:

$$\mathbf{v}^f = \mathbf{v}_A^s \quad (3.4.8)$$

Такође, ако су брзине чворова на граници солида једнаке међусобно, тј.

$$\mathbf{v}_A^s = \mathbf{v}_B^s = \mathbf{v}_C^s = \dots = \mathbf{v}_n^s = \mathbf{v}^s \quad (3.4.9)$$

тада је, према једначини (7):

$$\mathbf{v}^f = \mathbf{v}^s \quad (3.4.10)$$

3.4.2 Модификација једначине баланса коначног елемента флуида

Једначина баланса коначног елемента флуида у матричној нотацији је:

$$\delta^{n+1} \mathbf{V}^{fT} \hat{\mathbf{K}} \Delta \mathbf{V}^f = \delta^{n+1} \mathbf{V}^{fT} \hat{\mathbf{F}} \quad (3.4.11)$$

Ова једначина одговара крају временског корака и текућој итерацији, где су $\hat{\mathbf{K}}$ и $\hat{\mathbf{F}}$ еквивалентна матрица елемента и вектор чворних сила, респективно.

Даље, једначину (3.4.6) можемо написати у форми:

$$\mathbf{V}^f = \mathbf{T}\bar{\mathbf{V}} = \mathbf{T} \begin{bmatrix} \mathbf{V}^s \\ \bar{\mathbf{V}}^f \end{bmatrix} \quad (3.4.12)$$

где су \mathbf{V}^s брзине у чворовима солида у домену интерполације, док су $\bar{\mathbf{V}}^f$ брзине чворова елемента флуида који нису на контури флуида. Матрица трансформације у релацији (3.4.12) је:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{k} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (3.4.13)$$

где матрица \mathbf{k} садржи коефицијенте \bar{k}_j према једначини (3.4.6), а \mathbf{I} је јединична матрица. Чворови не морају да буду распоређени као што је назначено у једначини (3.4.12). Важно је само да у производу $\mathbf{V}^f = \mathbf{T}\bar{\mathbf{V}}$ релација (3.4.6) мора бити задовољена, као и релација идентитета за чворове који се не налазе на контури флуида. Димензија матрице \mathbf{T} (за дводимензионални случај) је:

$$2N \times (2n + 2\bar{N}) \quad (3.4.14)$$

где су:

N - број чворова са границе солида који припадају текућем елементу флуида (елемент флуида који садржи најмање један контурни чвор);

$N_{contour}$ - број чворова елемента који се налазе на контури флуида;

$$\bar{N} = N - N_{contour}.$$

Заменом (3.4.12) у (3.4.11) добијамо:

$$\delta\bar{\mathbf{V}}^T \mathbf{T}^T \hat{\mathbf{K}} \mathbf{T} \Delta\bar{\mathbf{V}} = \delta\bar{\mathbf{V}}^T \mathbf{T}^T \hat{\mathbf{F}} \quad (3.4.15)$$

тако да се сада равнотежна једначина коначног елемента флуида трансформише у:

$$\mathbf{T}^T \hat{\mathbf{K}} \mathbf{T} \Delta\bar{\mathbf{V}} = \mathbf{T}^T \hat{\mathbf{F}} \quad (3.4.16)$$

или:

$$\bar{\mathbf{K}} \Delta\bar{\mathbf{V}} = \bar{\mathbf{F}} \quad (3.4.17)$$

где су:

$$\bar{\mathbf{K}} = \mathbf{T}^T \hat{\mathbf{K}} \mathbf{T}, \quad \bar{\mathbf{F}} = \mathbf{T}^T \hat{\mathbf{F}} \quad (3.4.18)$$

Димензија модификоване матрице елемента $\bar{\mathbf{K}}$ је $(2n + 2\bar{N}) \times (2n + 2\bar{N})$ а вектора чворних сила елемента $\bar{\mathbf{F}}$ је $(2n + 2\bar{N})$.

3.4.3 Кораци у прорачуну

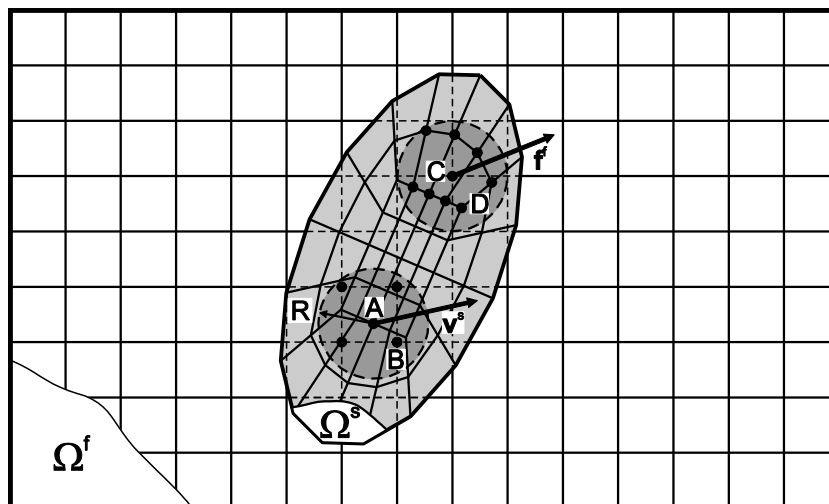
- а) Одредити контуру флуида.
- б) Формирати идентификациону матрицу степена слободе флуида и солида, полазећи од степена слободе чворова флуида који нису прекривени солидом и који нису на контури флуида, а затим за степене слободе солида (укључујући и чворове солида који се налазе на контури).
- в) Укупан број једначина се добија када се искључе степени слободе за чворове флуида који су прекривени солидом као и чворови који се налазе на контури флуида.
- г) За текући елемент флуида који има чворове који се налазе на контури флуида одреди се укупан број степени слободе $NDES = (2n + 2\bar{N})$. Затим се формира вектор степени слободе елемента флуида који садржи бројеве једначина чворова флуида који нису контурни и бројеве једначина чворова солида који улазе у домен чворова текућег елемента флуида који се налазе на контури.
- д) Формира се матрица трансформације \mathbf{T} на начин тако да задовољи једначину (3.4.12) и да узме у обзир редослед једначина у локалном вектору степени слободе.
- ђ) Израчунава се матрица елемента $\hat{\mathbf{K}}$ и вектор чворних сила $\hat{\mathbf{F}}$, као што је уобичајено за елемент флуида.

3.5 Метода потопљене границе [75] („Immersed Boundary Method“)

Шема домена флуида и солида је приказана на слици 3-8. Имамо следеће домене:

1. Домен флуида, ван границе солида Ω^f
2. Домен солида Ω^s
3. Целокупни домен, који представља унију домена флуида и солида:

$$\Omega = \Omega^f \cup \Omega^s \quad (3.5.1)$$



Слика 3-8: Шематски приказ “immersed boundary” методе

3.5.1 Детаљи у формирању једначина

Струјање флуида је описано Навије-Стоксовим једначинама за цео домен Ω , уз коришћење услова некомп्रेसибилности у једначини баланса масе. Процедура решавања методом коначних елемената има стандардну форму, са граничним условима за домен флуида.

Једначина баланса у материјалној тачки солида се може написати у следећем облику:

$$\rho^s \dot{v}_i^s = \sigma_{ij,j}^s + f_i^{Vs} \quad (3.5.2)$$

Одговарајућа једначина баланса за флуид (за исту материјалну тачку) је:

$$\rho^f \dot{v}_i^f = \sigma_{ij,j}^f + f_i^{Vf} \quad (3.5.3)$$

Претпоставка је да су брзине солида и флуида једнаке, тј.:

$$v_i^s = v_i^f \equiv v_i \quad (3.5.4)$$

Једначина баланса (3.5.3) може бити написана у следећем облику (где, због лакшег писања, користимо $\rho^f \equiv \rho$),

$$\rho \dot{v}_i = \sigma_{ij,j}^f + f_i^{Vf} + f_i^{FSI,s} \quad (3.5.5)$$

Овде је сила интеракције $f_i^{FSI,s}$:

$$f_i^{FSI,s} = -(\rho^s - \rho) \dot{v}_i + \sigma_{ij,j}^s - \sigma_{ij,j}^f + f_i^{Vs} - f_i^{Vf} \quad (3.5.6)$$

која је добијена из једначине (3.5.3) додавањем и одузимањем истог члана на левој и на десној страни једначине:

$$\rho^s \dot{v}_i + \rho \dot{v}_i - \rho \dot{v}_i = \sigma_{ij,j}^s + \sigma_{ij,j}^f - \sigma_{ij,j}^f + f_i^{Vs} + f_i^{Vf} - f_i^{Vf} \quad (3.5.7)$$

Дакле, можемо извршити интеграцију једначине (3.5.5) у домену који обухвата солид – коришћењем мреже флуида – као домен окружен само флуидом, али сада уз присуство запреминских сила интеракције $f_i^{FSI,s}$.

3.5.1.1 Анализа (и алтернативе) једначина (3.5.2) - (3.5.7)

Једначину (3.5.2) можемо написати у облику:

$$\rho^s \dot{v}_i^s + \rho^f \dot{v}_i^f = \sigma_{ij,j}^f + f_i^{Vf} + \sigma_{ij,j}^s + f_i^{Vs} \quad (3.5.8)$$

добијеног сабирањем једначина (3.5.2) и (3.5.3). Ова једначина може даље бити написана у облику:

$$\rho^f \dot{v}_i^f = \sigma_{ij,j}^f + f_i^{Vf} - \rho^s \dot{v}_i^s + \sigma_{ij,j}^s + f_i^{Vs} + (\rho^f \dot{v}_i^f - \sigma_{ij,j}^f - f_i^{Vf}) \quad (3.5.9)$$

где део у загради представља једначину баланса. Можемо изоставити први и четврти члан на десној страни пошто се поништавају:

$$\sigma_{ij,j}^f - \sigma_{ij,j}^f = 0 \quad (3.5.10)$$

па једначина (3.5.5) постаје:

$$\rho^f \dot{v}_i^f = f_i^{Vf} - (\rho^s - \rho^f) \dot{v}_i^s + \sigma_{ij,j}^s + (f_i^{Vs} - f_i^{Vf}) \quad (3.5.11)$$

или

$$\rho^f \dot{v}_i^f = f_i^{Vf} + f_i^{sfi} \quad (3.5.12)$$

где је:

$$f_i^{sfi} = -(\rho^s - \rho^f) \dot{v}_i^s + \sigma_{ij,j}^s + (f_i^{Vs} - f_i^{Vf}) \quad (3.5.13)$$

запреминска сила интеракције.

Дакле, у области Ω^s искључујемо све чланове који се односе на напон у флуиду, и инкременталне једначине коначних елемената сводимо на следећи облик:

$${}^{n+1}\mathbf{K}_{vv}^{(i-1)} \Delta \mathbf{V}^{(i)} = \mathbf{F}^{ext} + {}^n \mathbf{F}^{sfi} - {}^{n+1}\mathbf{K}_{vv}^{(i-1)} {}^{n+1}\mathbf{V}^{(i-1)} \quad (3.5.14)$$

Касније ће бити описано како се добијају чворне силе ${}^n \mathbf{F}^{sfi}$. Запреминске чворне силе у чворовима елемената солида се могу израчунати на следећи начин:

$${}^n \mathbf{F}^{solid} = \frac{1}{V} \left(-\frac{1}{\Delta t} \int_V (\rho_s - \rho_f) \mathbf{N}^T \mathbf{N} dV ({}^n \mathbf{V} - {}^{n-1} \mathbf{V}) + \int_V \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^s dV + \int_V \mathbf{N}^T (\mathbf{f}^s - \mathbf{f}^f) dV \right) \quad (3.5.15)$$

3.5.1.2 Чворне вредности запреминских сила интеракције у тачкама солида

Вредности $f_i^{FSI,s}$ се израчунавају за све Гаусове тачке елемената солида, повезане су са најближим чвором елемента и осредњене:

$$f_{il}^{FSI,s} = \frac{1}{n_l} \sum_{K=1}^{n_l} f_{iK}^{FSI,s} \quad (3.5.16)$$

где је n_l број заједничких елемената чвора l .

Обично, напон у флуиду може бити занемарен у односу на напон у солиду, и може се користити само напон у солиду σ_{ij}^s . Ако се напон σ_{ij}^f користи, онда ови напони треба да буду изостављени из једначина (3.5.5) и (3.5.6); или, ако се користе у једначинама (3.5.5) и (3.5.6), онда изводи $\sigma_{ij,j}^f$ морају бити израчунати у Гаусовим тачкама елемената солида коришћењем мреже флуида (пронаћи позицију тачака солида унутар мреже флуида). Ове две опције ће бити истражене.

3.5.1.3 Чворне вредности запреминских сила интеракције у домену флуида

Из вредности сила интеракције у чворовима солида (тачке D на слици 3-8) израчунавају се вредности у чворовима флуида коришћењем дискретизоване делта функције (као у РКРМ методи). Стога, у домену утицаја имамо величину u у чвору J , тј. u_J (за тродимензионални случај):

$$u_J = \sum_I \phi_I \left(\frac{x_1}{h} \right) \phi_I \left(\frac{x_2}{h} \right) \phi_I \left(\frac{x_3}{h} \right) U_I \quad (3.5.17)$$

Интерполационе функције су [75], [71]:

$$\phi(r) = \left(\frac{27}{17} - \frac{30}{17} r^2 \right) \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{6}(r+2)^3, \quad -2 \leq r < -1 \\ \frac{2}{3} - r^2 \left(1 + \frac{r}{2} \right), \quad -1 \leq r < 0 \\ \frac{2}{3} - r^2 \left(1 - \frac{r}{2} \right), \quad 0 \leq r < 1 \\ -\frac{1}{6}(r-2)^3, \quad 1 \leq r < 2 \\ 0, \quad \text{у осталим случајевима} \end{array} \right. \quad (3.5.18)$$

Овде је $r = x/h$, где је h величина мреже а x је релативна координата од интерполационе тачке.

У овом случају, интерполација силе интеракције је:

$$\mathbf{f}_J^f = \sum_I \phi_I \left(\frac{x_1}{h} \right) \phi_I \left(\frac{x_2}{h} \right) \phi_I \left(\frac{x_3}{h} \right) \mathbf{f}_I^{FSI,s} \quad (3.5.19)$$

3.5.1.4 Интерполација запреминских чворних сила у флуиду у Гаусовим тачкама коначних елемената

Ово је уобичајени начин рачунања у методи коначних елемената:

$$\mathbf{f}^f = \sum_I N_I \mathbf{f}_I^f \quad (3.5.20)$$

где су N_I интерполационе функције коначних елемената.

3.5.1.5 Брзине у чворовима солида

Брзине у чворовима солида, као што је чвор А на слици 3-8, добијају се коришћењем истих РКРМ интерполационих функција (3.5.17), па стога следи:

$$\mathbf{V}_J^s = \sum_I \phi_I \left(\frac{x_1}{h} \right) \phi_I \left(\frac{x_2}{h} \right) \phi_I \left(\frac{x_3}{h} \right) \mathbf{V}_I^f \quad (3.5.21)$$

Претпоставка је да су и солид и флуид некомп्रेसибилни.

3.5.2 Кораци у прорачуну

Рачун се одвија на следећи начин [71], [75]:

- а) На почетку временског корака, претпоставља се да је познато поље брзина ${}^n \mathbf{v}$ (тј. чворне вредности ${}^n \mathbf{V}$) за цео домен Ω . Такође, познат је и положај солида (чворни вектори положаја ${}^n \mathbf{X}$). На почетку решавања (први временски корак) решавамо поље брзина у флуиду без солида (унутрашње силе у солиду су једнаке нули, за недеформисану конфигурацију).
- б) Израчунамо запреминске силе интеракције \mathbf{f}^f у чворовима мреже флуида (тачка С на слици 3-8) као интерполацију запреминских чворних сила у солиду (тачке D на слици 3-8).
- в) Израчунамо поље брзина за целокупан домен Ω .
- г) Интерполирамо брзине са мреже флуида на мрежу солида: израчунавамо брзину \mathbf{V}^s у тачки А као интерполацију брзина из тачака В (слика 3-8).
- д) Одредимо положај солида на крају временског корака:

$${}^{n+1} \mathbf{X} = {}^n \mathbf{X} + \Delta t {}^{n+1} \mathbf{V}^s \quad (3.5.22)$$

Резиме

У овом поглављу изложени су детаљи примене различитих методологија за решавање проблема солид – флуид интеракције методом јаког спрезања. За све приказане методе су учињени покушаји имплементације у програмски пакет ПАК. Међутим, ни једна од приказаних метода није дала решење за које се може сматрати да је поуздано у погледу тачности и стабилности.

Проблеми који се срећу код свих ових метода су генерално слични. Један од проблема је појава нестабилности у флуиду услед генерисања великих вредности чворних сила. Један од разлога због којих се јављају велике вредности чворних сила је настајање и нестајање елемената флуида. Елементи флуида које обухвата спољашња контура солида су неактивни, а кретањем солида преко домена флуида долази до промене прекривености елемената флуида.

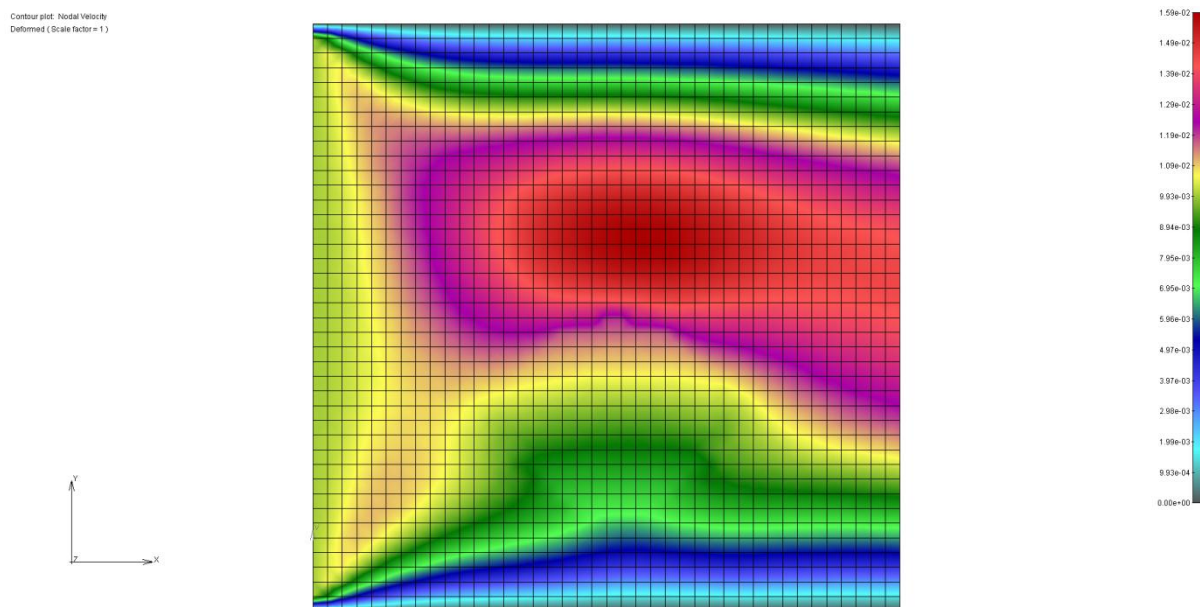
Код Ојлерове формулације проблем настаје и у пресликавању померања са мреже флуида на мрежу солида. Ово пресликавање даје извесну нумеричку грешку, која се манифестује у облику пикова у пољу брзина у флуиду. Пикови се временом увећавају, што проузрокује и појаву великих сила, увећаних деформација солида, великих напона у солиду, итд.

Код методе потопљене границе (Immersed boundary method) се такође јављају мали пикови у брзинама флуида. Ова метода је базирана на израчунавању запреминских сила интеракције између флуида и солида. Присуство ових сила такође доводи до нестабилности. Проблем који се јавља код ове методе је раст солида у току кретања. Запремина солида (односно површина у случају дводимензионалног модела) не остаје константна у току времена, па се не може очекивати да решења која даје ова методологија буду задовољавајућа.

На сликама 3-9 и 3-10 је дато једно од решења за тест пример који је коришћен за тестирање свих приказаних методологија. Домен флуида је квадратног облика са задатим правоугаоним профилем брзине (струјање између две плоче). Домен солида је диск, ексцентрично постављен у односу на осу симетрије домена флуида. Густина флуида је $\rho_f = 1.0 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$, динамичка вискозност флуида је $\mu = 1.0 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$, густина солида $\rho_s = 2.0 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$. Модул еластичности коришћен за деформабилна

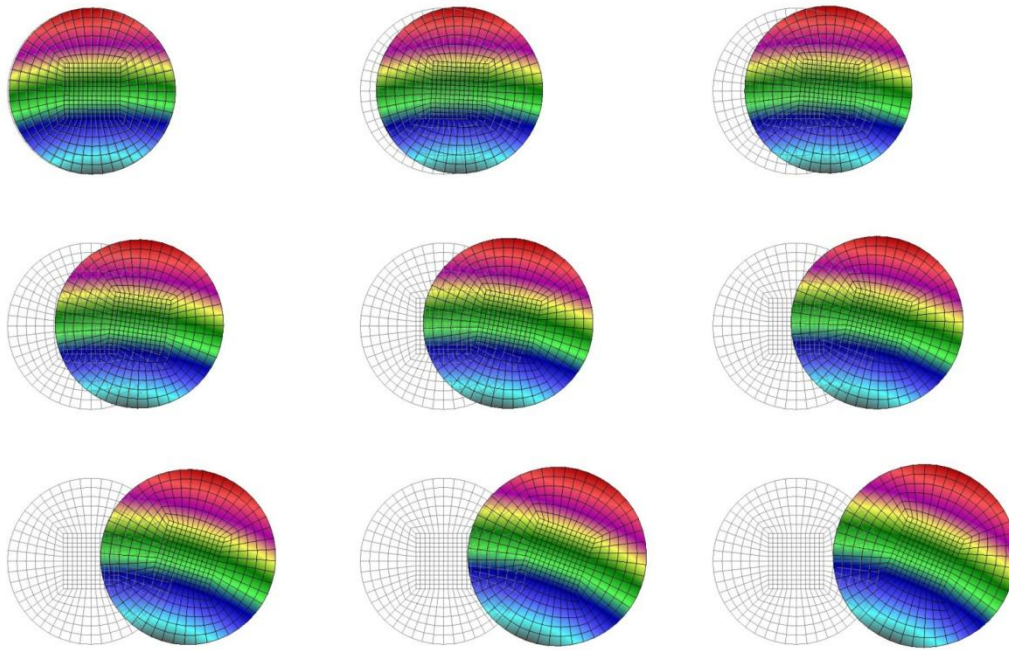
тела је $E = 10.0 \div 30.0 Pa$, а за крута тела $E = 1.0 \cdot 10^5 MPa$. Приказано решење је добијено методом потопљене границе (Immersed boundary method).

На слици 3-9 се могу приметити веома мали пикови у пољу брзина. Генерално посматрано, може се рећи да поље брзина има задовољавајући континуитет.



Слика 3-9: Решење за поље брзина у флуиду добијено методом потопљене границе

Међутим, код солида се јавља проблем са одржањем константне запремине у току кретања (односно површине у дводимензионалном случају). На слици 3-10 се може видети како се у току времена мења пречник цилиндричног диска у току кретања.



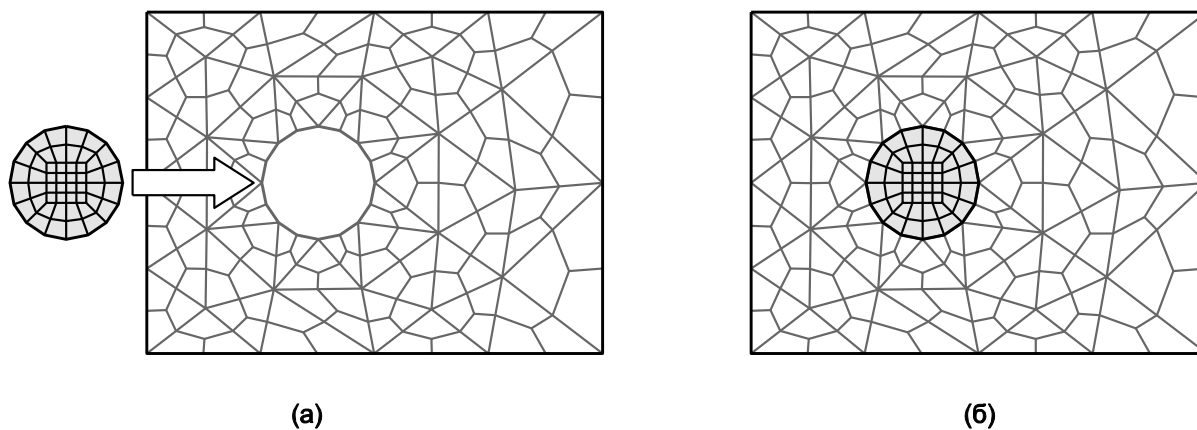
Слика 3-10: Повећање површине диска у току кретања

4 Методологија заснована на ажурирању мреже у току кретања тела

У овој глави је детаљно описан концепт моделирања солид – флуид интеракције методом јаког спрезања са ажурирањем мреже у току времена. Такође, дат је и детаљан опис интеракције између два тела солида или између солида и зида (односно, границе домена флуида).

4.1 Основни концепт

Методологија заснована на ажурирању мреже у току кретања солида подразумева да се на граници између флуида и солида чворови ова два медијума геометријски подударaju у току једног корака. Основна претпоставка је да је брзина у сваком чвору са контуре солида једнака брзини флуида у чвору који одговара посматраном чвору солида. Према томе, степен слободе који одговара брзини у чвору солида је истовремено и степен слободе брзине флуида у одговарајућем чвору.



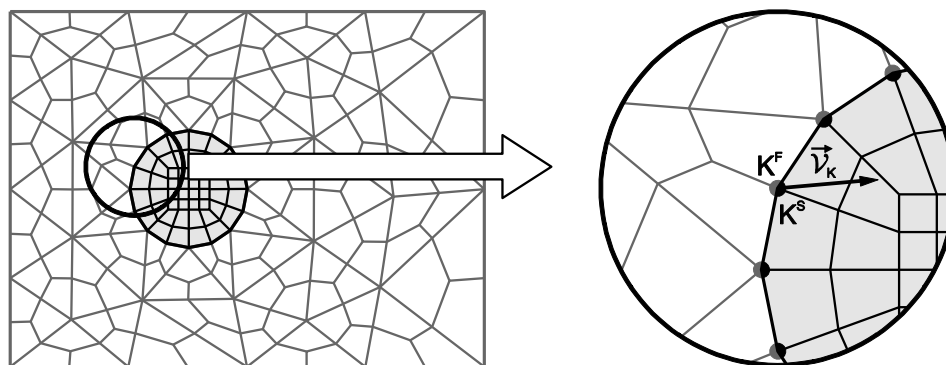
На слици 4-1.а приказане су одвојено мрежа солида и мрежа флуида, а на слици 4-1.б приказан је изглед мреже у случају када су солид и флуид спрегнути. Једначине кретања солида су изведене у Лагранжевој формулацији, тако да се мрежа солида у току времена креће. Према томе, није потребно у сваком новом кораку генерисати нову мрежу солида. Једначине срујања флуида су изведене уз примену Ојлерове формулације и дефиниције материјалног извода. Дакле, посматра се непомична

геометријска тачка простора и физичке величине материјалне тачке која се тренутно налази у посматраној геометријској тачки простора. Када се реши систем једначина, положај солида се ажурира на основу решења за брзине солида. Као што је већ напоменуто, концепт решавања једначина струјања флуида је такав да је мрежа непомична. Према томе, за нови положај солида више не постоји поклапање контурних чворова солида са контурним чворовима флуида. Због тога је потребно на неки начин направити нову мрежу, и пренети решења за брзине и притиске са "старе" на "нову" мрежу флуида.

У наставку ће детаљно бити објашњена процедура ажурирања мреже и "мапирање" (пројектовање) брзина и притисака у новој мрежи на основу последњег познатог решења.

4.1.1 Повезивање једначина солида и флуида у заједнички систем једначина

Систем једначина који је потребно решити састоји се од једначина које описују кретање и деформисање солида и једначина које описују ламинарно струјање вискозног нестишљивог флуида. Повезивање ових једначина остварује се у заједничким чворовима солида и флуида.



Слика 4-2: Шематски приказ контурних чворова

Нумерисање једначина се обавља слично као код осталих проблема који се решавају методом коначних елемената. Прво се нумеришу једначине које припадају чворовима мреже флуида. Затим се нумеришу једначине које припадају чворовима мреже солида, али, за чворове који се налазе на граници са флуидом узимају се бројеви једначина из

флуида. Дакле, контурни чвор солида и одговарајући чвор флуида имају исте бројеве једначина, односно исте степене слободе (Слика 4-2):

$$v_{Ki}^f = v_{Ki}^s, \quad i = 1, 3 \quad (4.1.1)$$

где су индексом i означене компоненте брзина у Декартовом координатном систему, а индексом K текући чвор на контури. Једначина (4.1.1) је написана за тродимензионални проблем. Према је циљ овог рада истраживање метода дводимензионалног моделирања проблема интеракције, вектори брзина имају компоненте само у xy равни. Стога ћемо се код једначине (4.1.1) ограничити на $i = 1, 2$, односно на правце x и y .

Приликом паковања матрица елемента у систем, матрице контурних елемената флуида и солида садрже чланове који се пакују у исту једначину. Дакле, једначине које одговарају контурним чворовима имају доприносе из оба домена: солида и флуида.

4.2 Приказ концепта ажурирања мреже у сваком кораку

4.2.1 Генерисање мреже

Мрежа солида се генерише једном, и најчешће се изводи коришћењем правилних (структурних) мрежа коначних елемената. Приликом генерисања потребно је одредити који чворови се налазе на спољашњој контури солида, и одредити њихов редослед (у произвољном смеру). Ови чворови представљају границу до које се простира мрежа флуида.

Мрежа флуида се генерише у сваком кораку. С обзиром да положај солида, облик, и број различитих тела може бити произвољан, врло је компликовано направити генератор структурне мреже. Зато је сврсисходније применити генератор неструктурне мреже. Један од најпознатијих алгоритама за генерисање неструктурних мрежа је тзв. Делонејева триангулација (Delaunay triangulation). Велики број квалитетних генератора мреже је базиран на овом алгоритму. Један од потенцијалних недостатака оваквих генератора мреже коначних елемената је то што је мрежа коју генеришу сачињена од троуглова. Троугао као коначни елемент има велику примену, али за проблем решавања Навије-Стоксових једначина није се показао као оптимално решење у погледу тачности решења. Показало се да четворочворни коначни елементи дају знатно боље резултате. Стога ће у овом раду бити примењен програм *Triangle* [38], а троуглови који се добијају као излаз из овог програма ће бити дељени на три четворочворна коначна елемента помоћу програма *TriangleToQuadConverter* [52].

У почетном временском тренутку имамо познату позицију солида и познате контурне чворове солида. За домен флуида позната је контура зидова и податак о задатим граничним условима на тој контури. Главни управљачки програм *PAKSF_remeshing*, у коме се налази комплетан солвер за решавање овог система једначина, учитава основне податке о флуиду (тип анализе, временске периоде, материјалне карактеристике флуида, и сл.). Затим се учитава мрежа солида и контурни чворови солида. На основу ових података позива се програм *MeshGenerator*. Овај програм, који обједињује програме *Triangle* и *TriangleToQuadConverter*, генерише мрежу четворочворних коначних елемената и записује је у фајл. Мрежа се затим учитава у главни програм. Програм *PAKSF_remeshing* сада садржи податке о мрежи солида, мрежи флуида и

контурним чворовима солида. На основу познатих контурних чворова солида, одређују се чворови у флуиду који се са њима подударају.

4.2.2 Ажурирање мреже и мапирање резултата из последњег познатог решења

На крају временског корака, када је постигнута конвергенција, добијено је решење за поље брзина у солиду и флуиду и поље притиска у флуиду. На основу израчунатих брзина у солиду могу се израчунати померања солида:

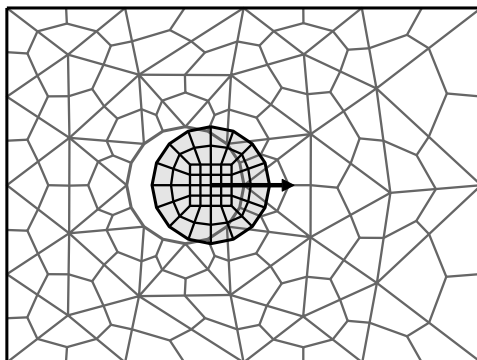
$${}^{t+\Delta t} \mathbf{u}_k = {}^{t+\Delta t} \mathbf{v}_k \Delta t, \quad k = 1, N \quad (4.2.1)$$

где су:

N - укупан број чворова солида,

Δt - величина временског корака интеграције.

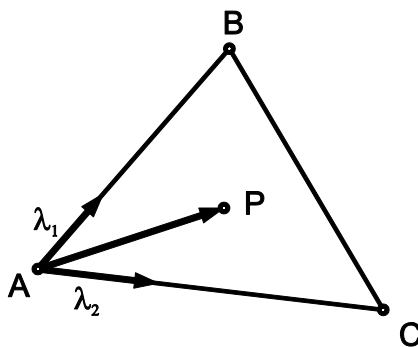
С обзиром на чињеницу да се код флуида користи Ојлеров опис кретања материјалних честица, претпоставка је да је мрежа коначних елемената флуида непокретна у простору. Насупрот томе, код солида се користи Лагранжев опис кретања код кога се материјална тачка креће у простору, па се, према томе, геометријски положај мреже солида мења током времена. Концепт који је примењен за моделирање подразумева да се чворови на контурама солида и флуида подударају. Међутим, на крају временског корака, када је израчунато поље померања у солиду и ажуриран положај тела, контурни чворови солида се више не поклапају са контурним чворовима флуида (Слика 4-3). Из тог разлога је потребно направити нову мрежу флуида, чији ће се контурни чворови поклапати са контурним чворова солида у новом положају. Нова мрежа флуида се генерише на начин како је описано у претходним секцијама. У општем случају не постоји поклапање чворова старе и нове мреже флуида. Вредности физичких величина у чворовима нове мреже је потребно израчунати на основу решења из старе мреже.



Слика 4-3: Положај непокретне мреже флуида и покретне мреже солида на крају корака

Интерполација брзина и притисака са старе на нову мрежу је релативно једноставан задатак. За сваки чвор нове мреже потребно је одредити унутар ког елемента старе мреже се налази. Пошто су коначни елементи полигони са четири тачке, испитивање да ли се неки чвор нове мреже флуида налази унутар неког елемента старе мреже, може се одредити применом барицентричних координата [4].

Сваки четворочворни коначни елемент је конвексан четвороугао. Према томе, сваки елемент се може поделити на два троугла које чине по две странице и једна дијагонала посматраног четвороугла. Да ли је нека тачка (чвор) унутар неког троугла може се испитати одређивањем координата тачке у барицентричном координатном систему посматраног троугла (Слика 4-4).



Слика 4-4: Барицентричне координате троугла

Вектори страница троугла су:

$$\mathbf{v}_0 = \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A \quad (4.2.2)$$

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{r}_C - \mathbf{r}_A \quad (4.2.3)$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{r}_P - \mathbf{r}_A \quad (4.2.4)$$

Барицентричне координате се израчунавају на следећи начин:

$$\lambda_1 = \frac{(v_1 \cdot v_1)(v_0 \cdot v_2) - (v_0 \cdot v_1)(v_1 \cdot v_2)}{(v_0 \cdot v_0)(v_1 \cdot v_1) - (v_0 \cdot v_1)(v_0 \cdot v_1)} \quad (4.2.5)$$

$$\lambda_2 = \frac{(v_0 \cdot v_0)(v_1 \cdot v_2) - (v_0 \cdot v_1)(v_0 \cdot v_2)}{(v_0 \cdot v_0)(v_1 \cdot v_1) - (v_0 \cdot v_1)(v_0 \cdot v_1)} \quad (4.2.6)$$

$$\lambda_3 = 1.0 - \lambda_1 - \lambda_2 \quad (4.2.7)$$

Пошто су барицентричне координате линеарна трансформација Декартових координата, следи да се оне линеарно мењају дуж страница и на површини троугла. Ако се нека тачка налази унутар троугла, све барицентричне координате су унутар отвореног интервала $(0.0; 1.0)$. Ако тачка лежи на некој од страница троугла, најмање једна барицентрична координата има вредност 0.0 , док су остале у затвореном интервалу $[0.0; 1.0]$. Дакле, тачка P се налази унутар троугла ако је задовољен услов:

$$0.0 \leq \lambda_i \leq 1.0, \quad i = 1, 3 \quad (4.2.8)$$

Када се за текући чвор нове мреже одреди унутар ког елемента старе мреже се налази, потребно је одредити вредност координата тачке у локалном координатном систему елемента $r - s$. За ово се користи Њутнова метода решавања система две једначина са две непознате. Када пронађемо вредности координата посматраног чвора у локалном координатном систему елемента, једноставном интерполацијом се долази до вредности физичких величина за дати чвор:

$${}^{n+1}v_i = N_K {}^n v_i^K, \quad i = 1, 2 \quad (4.2.9)$$

$${}^{n+1}p_i = N_K {}^n p_i^K, \quad i = 1, 2 \quad (4.2.10)$$

где су:

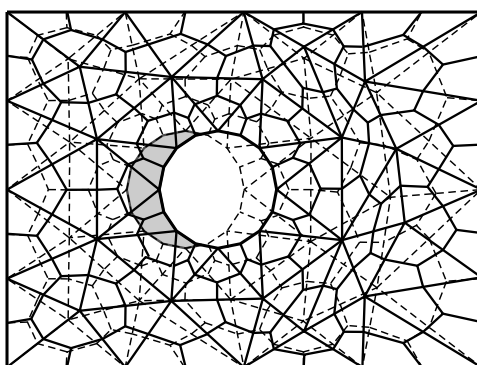
N_K - интерполационе функције за вредност претходно одређених координата (r, s)

${}^n p_i^K, {}^n v_i^K$ - чворне вредности притисака и компонената брзина за елемент старе мреже унутар кога се налази посматрани чвор нове мреже,

${}^{n+1}p_i$, ${}^{n+1}v_i$ - вредности притиска и компонената брзина у текућем чвору нове мреже.

Горњим левим индексима n и $n+1$ означене су вредности притисака и брзина на крају текућег и на почетку следећег временског корака, респективно.

На претходно описан начин се добијају вредности физичких величина у чворовима нове мреже. Међутим, када се преклопе нова и стара мрежа коначних елемената, појављују се чворови нове мреже који су ван свих елемената старе мреже. Ово се догађа у непосредној близини границе солида и флуида, у зони где се у текућем кораку налазио солид, а у наредном кораку се налази флуид (Слика 4-5).



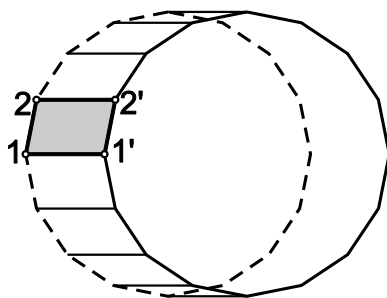
Слика 4-5: Зона (осенчена на слици) у којој се налазе чворови за које не може да се уради интерполација

Интерполацију брзина и притисака за чворове у овој области могуће је извести на више начина.

Прва могућност је да се чворови старе мреже флуида који се налазе на граници са солидом помере у положај који заузимају у новој мрежи. Тада добијамо деформисане елементе флуида које можемо искористити за интерполацију, али, зависно од величине померања у временском кораку, овакви елементи могу бити знатно деформисани, па се може догодити да интерполиране вредности прилично одступају од тачног решења.

Друга могућност је да се за поменуте чворове користи интерполација брзина из солида (пошто се ти чворови налазе у области у којој се претходно налазио солид). На овај начин је решен проблем интерполације брзина али не и притисака. Оваква апроксимација може такође да да грешку која није занемарљива, и која се у нестационарном режиму струјања може временом увећати.

Трећа варијанта, која је и примењена у програму је да се направе фиктивни дводимензионални елементи које чине чворови контуре солида и чворови са контуре флуида у старој мрежи коначних елемената, са познатим вредностима брзина (и притисака за чворове флуида), да би се у овом елементу извршила интерполација чворова нове мреже у фиктивном елементу . Један такав елемент је приказан на слици 4-6.



Слика 4-6: Фиктивни 2Д елементи за интерполацију брзина и притисака

На овај начин је решен проблем интерполације физичких величина са мреже коришћене у текућем кораку на нову мрежу која се користи у наредном кораку.

Поред интерполације физичких величина, у новом кораку потребно је урадити нумерацију степени слободе за нову мрежу.

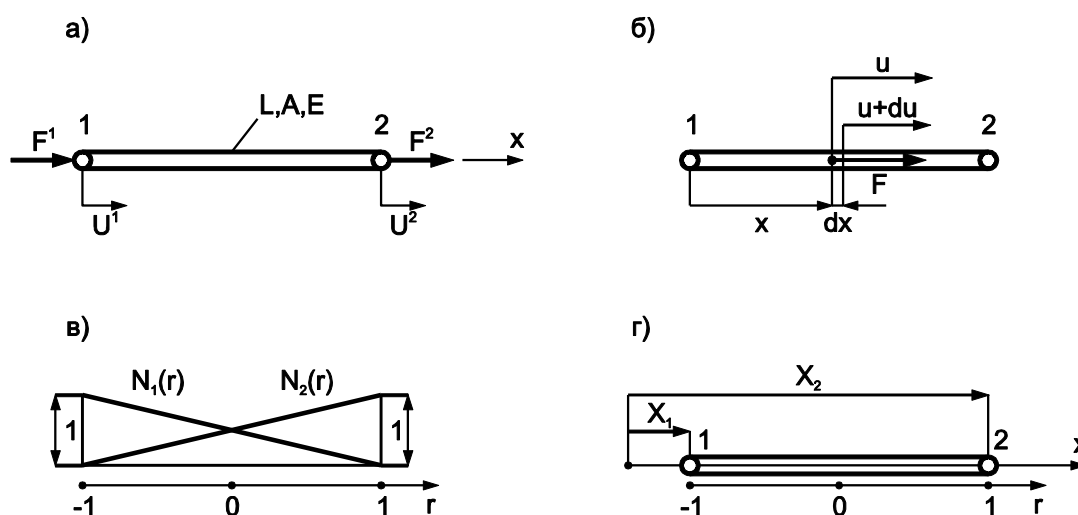
4.3 Моделирање интеракције између солида

Приликом моделирања кретања тела у флуиду, осим проблема интеракције флуида и солида, присутан је проблем интеракције између два тела, као и проблем интеракције тела са спољашњом границом флуида (зидом цеви или канала, који окружује флуид).

У току кретања честица кроз флуид може доћи до проласка честице кроз зид, односно до изласка честице из флуидног домена. Такође, може се догодити да се две честице делимично или потпуно преклопе. Једна од метода која спречава овакве физички недопустиве услове је увођење тзв. фиктивних линијских коначних елемената. У даљем тексту биће изложена математичка формулација једнодимензионалних елемената, а затим њихова примена за моделирање интеракције између солида.

4.3.1 Линијски коначни елемент (штап)

Посматрајмо штап дужине L , попречног пресека A , чији је материјал еластичан, модула еластичности E (слика 4-7.а). На крајевима штапа налазе се чворови 1 и 2. Силе које делују у чворовима називају се чворне силе. У тачки са координатом x померање је u , а у тачки са координатом $x+dx$ померање је $u+du$ (слика 4-7.б)[41].



Слика 4-7: Једнодимензионални линеарни коначни елемент. а) Геометрија, померања и силе; б) Величине у тачки елемента; в) Интерполационе функције; г) Интерполација геометрије

Пошто је напон константан у односу на координату x (нема додатних сила дуж елемента), константна је и деформација e :

$$e = \frac{du}{dx} = \frac{\sigma}{E} = \frac{F}{AE} \quad (4.3.1)$$

У претходној једначини коришћен је Хуков закон и релација за напон $\sigma = \frac{F}{A}$, где је F - аксијална сила, A - површина попречног пресека. Пошто је аксијална сила константна дуж елемента, померање дуж елемента можемо израчунати интегралом једначине (4.3.1):

$$u = \frac{F}{AE}x + U^1 \quad (4.3.2)$$

У једначини (4.3.2) искоришћен је гранични услов $u = U^1$ за $x = 0$.

Из претходне једначине можемо да израчунамо померање чвора 2:

$$U^2 = \frac{F}{AE}L + U^1 \quad (4.3.3)$$

Ако сада из једначине (4.3.3) изразимо коефицијент $\frac{F}{AE}$, и заменимо га у једначини (4.3.2) добићемо израз за померање у функцији од U^1 и U^2 :

$$u = \left(1 - \frac{x}{L}\right)U^1 + \frac{x}{L}U^2 \quad (4.3.4)$$

Бездимензионална координата $\frac{x}{L}$ се мења у границама од 0 до 1. У методи коначних елемената је уобичајено да се користи бездимензионална координата везана за средиште елемента, и да се унутар елемента мења од -1 до 1 (слика 4-7.в). Оваква координата, која се назива и природна, може да се изрази у функцији бездимензионалне координате $\frac{x}{L}$:

$$r = -1 + 2\frac{x}{L} \quad (4.3.5)$$

Из релације (4.3.5) можемо једноставно изразити координату x у функцији од r :

$$x = \frac{L}{2}(1+r) \quad (4.3.6)$$

Претходне две једначине представљају координатну трансформацију између Декартовог и природног координатног система за једнодимензионални случај.

Ако сада из једначине (4.3.5) изразимо $\frac{x}{L}$ и заменимо у једначини за померање (4.3.4)

добићемо:

$$u = \frac{1}{2}(1-r)U^1 + \frac{1}{2}(1+r)U^2 \quad (4.3.7)$$

Израз (4.3.7) можемо написати у матричном облику:

$$u = \mathbf{N}\mathbf{U} \quad (4.3.8)$$

где је \mathbf{N} вектор врста интерполационих функција:

$$\mathbf{N} = [N_1 \quad N_2] = \left[\frac{1}{2}(1-r) \quad \frac{1}{2}(1+r) \right] \quad (4.3.9)$$

а \mathbf{U} је вектор колона чворних померања:

$$\mathbf{U} = \begin{Bmatrix} U^1 \\ U^2 \end{Bmatrix} \quad (4.3.10)$$

Из интерполације (4.3.8) следи и интерполација за координату x тачке унутар елемента:

$$x = \mathbf{N}\mathbf{X} \quad (4.3.11)$$

где је \mathbf{X} вектор чворних померања. Ако са 0x и ${}^t x$ означимо положај материјалне тачке у почетном тренутку и у неком тренутку t , тада су интерполације положаја материјалних тачака у почетном тренутку и тренутку t :

$$\begin{aligned} {}^0x &= \mathbf{N}^0 \mathbf{X} \\ {}^t x &= \mathbf{N}^t \mathbf{X} \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

померање од положаја 0x до ${}^t x$ је:

$$u = {}^t x - {}^0x = \mathbf{N}({}^t \mathbf{X} - {}^0 \mathbf{X}) = \mathbf{N}\mathbf{U} \quad (4.3.13)$$

4.3.2 Равнотежа елемента и матрица крутости

За елемент штапа (Слика 4-7) једнакост виртуалних радова спољашњих и унутрашњих сила је:

$$\delta A^{\text{int}} = \int_{V^e} \delta \mathbf{e}^T \boldsymbol{\sigma} dV^e = (\delta \mathbf{U}^e)^T \mathbf{F}^e = \delta A^{se} \quad (4.3.14)$$

где су:

\mathbf{e} - вектор деформације (за једнодимензиони случај скалар),

$\boldsymbol{\sigma}$ - вектор напона (за једнодимензиони случај, такође скалар),

\mathbf{U}^e и \mathbf{F}^e - чворне вредности померања и сила,

V^e - запремина коначног елемента.

Матрични производ $(\delta \mathbf{U}^e)^T \mathbf{F}^e$ у развијеном облику је:

$$(\delta \mathbf{U}^e)^T \mathbf{F}^e = \sum_{i=1}^2 \delta U^i F^i = \delta U^1 F^1 + \delta U^2 F^2 \quad (4.3.15)$$

За једнодимензионални случај, деформација је дефинисана следећим изразом:

$$e = \frac{du}{dx} \quad (4.3.16)$$

Ако у једначину (4.3.16) уведемо интерполацију за поље померања (4.3.8), добићемо:

$$e = \frac{d}{dx} \mathbf{N} \mathbf{U}^e \quad (4.3.17)$$

односно:

$$e = \left[\frac{d}{dx} N_1 \quad \frac{d}{dx} N_2 \right] \begin{Bmatrix} U^1 \\ U^2 \end{Bmatrix} \quad (4.3.18)$$

Матрица која садржи изводе интерполационих функција представља везу између деформације и чворних померања:

$$\mathbf{B} = \left[N_{1,x} \quad N_{2,x} \right] \quad (4.3.19)$$

Једначина (4.3.18) је сада:

$$e = \mathbf{B}\mathbf{U}^e \quad (4.3.20)$$

Изводи $N_{1,x} = \frac{dN_1}{dx}$ и $N_{2,x} = \frac{dN_2}{dx}$ се могу израчунати коришћењем једначине (4.3.5):

$$\mathbf{B} = J^{-1} \begin{bmatrix} N_{1,r} & N_{2,r} \end{bmatrix} \quad (4.3.21)$$

где је J^{-1} инверзни Јакобијан трансформације између Декартовог и природног координатног система. Јакобијан и инверзни Јакобијан можемо једноставно израчунати из једначина (4.3.5) и (4.3.6):

$$J = \frac{dx}{dr} = \frac{L}{2} \quad (4.3.22)$$

$$J^{-1} = \frac{dr}{dx} = \frac{2}{L} \quad (4.3.23)$$

Изводе у матрици (4.3.21) можемо једноставно израчунати аналитички, диференцирањем полинома N_1 и N_2 по природној координати r .

Коначно, матрица извода интерполационих функција је:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{L} & \frac{1}{L} \end{bmatrix} \quad (4.3.24)$$

Вратимо се сада на равнотежну једначину. Виртуална деформација δe , која одговара вектору виртуалних померања $\delta \mathbf{U}^e$ добија се из (4.3.20):

$$\delta e = \mathbf{B}\delta \mathbf{U}^e \quad (4.3.25)$$

Напон σ у изразу (4.3.14) може се, коришћењем конститутивне релације – Хуковог закона, повезати са деформацијом:

$$\sigma = Ee \quad (4.3.26)$$

Заменом израза (4.3.26), (4.3.25) и (4.3.20) у једначину (4.3.14) добићемо:

$$dA^{\text{int}} = \int_{V^e} \delta e \sigma dV^e = \int_{V^e} \delta e E e dV^e = \int_{V^e} (\delta \mathbf{U}^e)^T \mathbf{B}^T E \mathbf{B} \mathbf{U}^e dV^e \quad (4.3.27)$$

Вредности у чворовима могу се извући ван интеграла:

$$dA^{\text{int}} = \int_{V^e} \delta e \sigma dV^e = \int_{V^e} \delta e E e dV^e = (\delta \mathbf{U}^e)^T \int_{V^e} \mathbf{B}^T E \mathbf{B} dV^e \mathbf{U}^e \quad (4.3.28)$$

Део израза под интегралом представља матрицу крутости коначног елемента:

$$\mathbf{K}^e = \int_{V^e} \mathbf{B}^T E \mathbf{B} dV^e \quad (4.3.29)$$

За израчунавање овог интеграла неопходно је прво трансформисати интеграл по запремини у интеграл по дужини елемента:

$$dV^e = A dx = A \frac{dx}{dr} dr \quad (4.3.30)$$

У претходној једначини је искоришћена координатна трансформација из Декартових координата у природне (4.3.23). Елементарна запремина може да се изрази као производ површине попречног пресека A , Јакобијана (4.3.22) и елементарне дужине dr природне координате. Из претходних једначина следи израз за матрицу крутости елемента:

$$\mathbf{K}^e = \int_{V^e} \begin{bmatrix} -\frac{1}{L} \\ \frac{1}{L} \end{bmatrix} E \begin{bmatrix} -\frac{1}{L} & \frac{1}{L} \end{bmatrix} A \frac{L}{2} dr \quad (4.3.31)$$

односно:

$$\mathbf{K}^e = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.3.32)$$

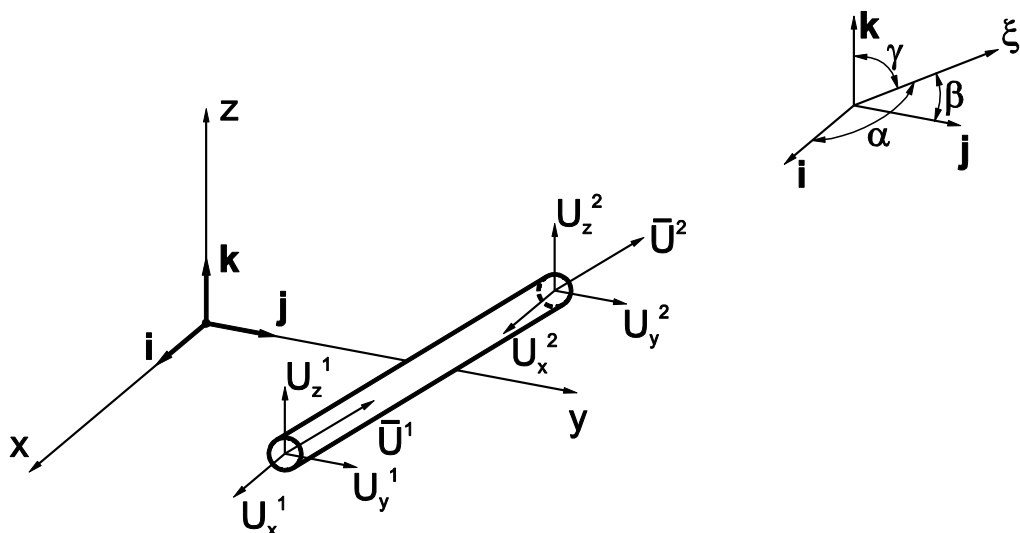
Једнакост виртуалних радова изражена једначином (4.3.14) сада можемо написати у матричном облику:

$$(\delta \mathbf{U}^e)^T \mathbf{K}^e \mathbf{U}^e = (\delta \mathbf{U}^e)^T \mathbf{F}^e \quad (4.3.33)$$

Претходна једначина ће бити задовољена уколико чланови на левој и десној страни који множе виртуална померања $\delta \mathbf{U}^e$ буду међусобно једнаки, односно:

$$\mathbf{K}^e \mathbf{U}^e = \mathbf{F}^e \quad (4.3.34)$$

Једначина (4.3.34) представља једначину равнотеже коначног елемента, која је изведена уз претпоставку да чворна померања имају правац елемента. С обзиром на то да једнодимензиони елемент може бити постављен произвољно у простору, и да чворна померања могу имати произвољан правац, потребно је претходну једначину трансформисати на глобални Декартов координатни систем.



Слика 4-8: Коначни елемент штапа са два чвора у простору

Посматрајмо штап произвољно постављен у простору (Слика 4-8). Нека је ζ_0 јединични вектор који дефинише правац штапа одређен косинусима углова које заклапа са осама Декартовог координатног система:

$$\zeta_0 = \cos \alpha \mathbf{i} + \cos \beta \mathbf{j} + \cos \gamma \mathbf{k} \quad (4.3.35)$$

Вектори померања у локалном и глобалном систему су респективно:

$$\bar{\mathbf{U}}^T = \{\bar{U}^1 \quad \bar{U}^2\} \quad (4.3.36)$$

$$\mathbf{U}^T = \{U_1^1 \quad U_2^1 \quad U_3^1 \quad U_1^2 \quad U_2^2 \quad U_3^2\} \quad (4.3.37)$$

Између ових вектора постоји зависност која се може матрично написати у следећем облику:

$$\bar{\mathbf{U}} = \mathbf{T}\mathbf{U} \quad (4.3.38)$$

где је:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \cos \beta & \cos \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos \alpha & \cos \beta & \cos \gamma \end{bmatrix} \quad (4.3.39)$$

матрица трансформације. Ова зависност се изводи пројектовањем вектора чворних померања у глобалном систему на правац штапа (вектор ζ_0). Такође, важи и релација:

$$\mathbf{T}\mathbf{T}^T = \mathbf{I} \quad (4.3.40)$$

где је \mathbf{I} јединична матрица 2×2 .

Матрицу крутости у глобалном систему добијамо из једнакости виртуалног рада унутрашњих сила, израженог преко величина у локалном и глобалном систему:

$$\delta \bar{\mathbf{A}}^{\text{int}} = \delta \mathbf{A}^{\text{int}} \quad (4.3.41)$$

односно:

$$\delta \bar{\mathbf{U}}^T \bar{\mathbf{K}}^e \bar{\mathbf{U}} = \delta \mathbf{U}^T \mathbf{K}^e \mathbf{U} \quad (4.3.42)$$

где је $\bar{\mathbf{K}}^e$ матрица крутости елемента у локалном систему (4.3.32). Заменом (4.3.38) у (4.3.42) добићемо:

$$\delta \mathbf{U}^T \mathbf{T}^T \bar{\mathbf{K}}^e \mathbf{T} \mathbf{U} = \delta \mathbf{U}^T \mathbf{K}^e \mathbf{U} \quad (4.3.43)$$

Одавде је очигледно:

$$\mathbf{K}^e = \mathbf{T}^T \bar{\mathbf{K}}^e \mathbf{T} \quad (4.3.44)$$

Последњи израз представља матрицу крутости елемента у глобалном систему. Такође, трансформација (4.3.38) важи и за вектор чворних сила:

$$\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{T} \mathbf{F} \quad (4.3.45)$$

где вектор $\bar{\mathbf{F}}$ има две компоненте у правцу штапа, а вектор \mathbf{F} шест компоненти (по три компоненте у оба чвора).

Коначно, једначина равнотеже у глобалном систему има следећу форму:

$$\mathbf{K}^e \mathbf{U} = \mathbf{F}^e \quad (4.3.46)$$

На крају, дајемо и инкременталну форму равнотежне једначине (4.3.46):

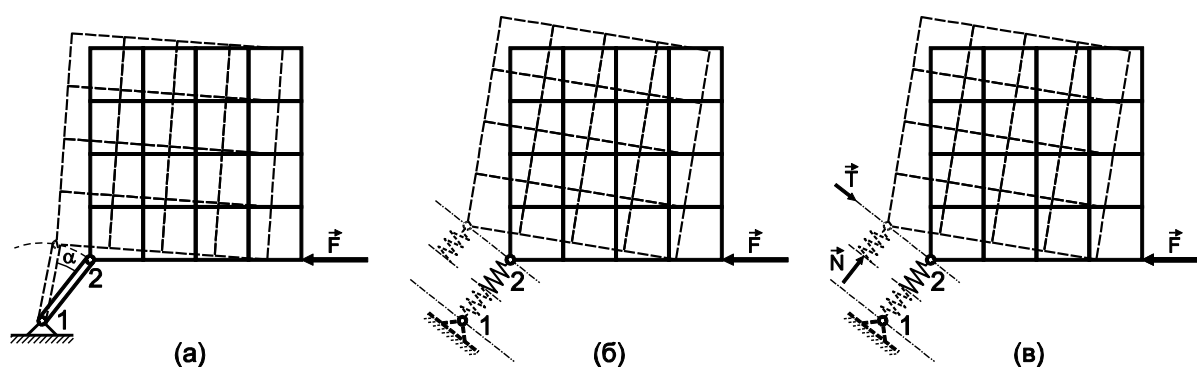
$$\mathbf{K}\Delta\mathbf{U}^i = \mathbf{F}^{\text{ext}} - \mathbf{F}^{\text{int}} \quad (4.3.47)$$

где је вектор унутрашњих сила $\mathbf{F}^{\text{int}} = \mathbf{K}\mathbf{U}^{i-1}$.

Претходна извођења се односе на једнодимензионалне елементе. Изведени су под претпоставком да се кинематика деформисања одвија искључиво у аксијалном правцу. Сходно томе, изведена је матрица крутости елемента у локалном координатном систему, која је уз помоћ координатне трансформације (4.3.39) преведена на глобални систем. Овако трансформисана матрица практично представља крутост у чворовима у правцу глобалних померања елемента. Под дејством произвољних оптерећења долази до промене правца елемената услед ротације.

4.3.3 Примена линијског елемента за моделирање интеракције

Посматрајмо прво интеракцију тела и зида, што се може сматрати моделирањем еластичног ослонаца. Претпоставимо да имамо неку конструкцију представљену мрежом коначних елемената и један једнодимензионални елемент који је једним својим чвором везан за поменути мрежу. Други чвор сматрамо да је ограничен, тј. да су његова померања једнака нули. Ако желимо да спречимо померање у правцу линијског елемента (штапа), узимамо да је модул еластичности једнодимензионалног елемента много већи од модула еластичности осталих елемената, па се може сматрати да је недеформабилан и да је померање у правцу штапа ограничено.

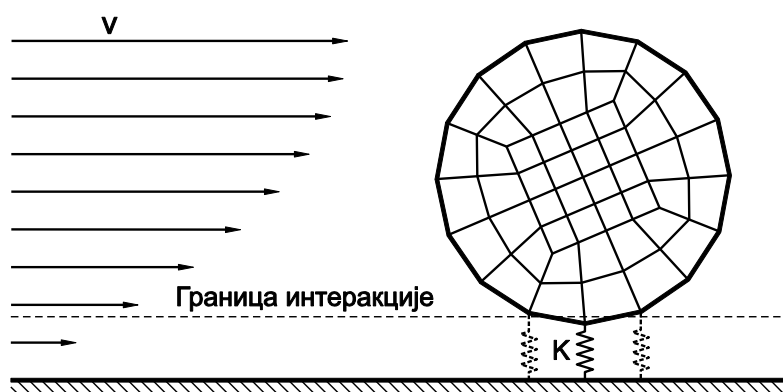


Слика 4-9: а) Једнодимензионални коначни елементи; б) еластични ослонаци; в) еластични ослонаци са силом трења

На слици 4-9.а приказан је ослонац остварен помоћу недеформабилног штапа који не допушта померање у правцу штапа, али дозвољава ротацију. На слици 4-9.б) приказан је еластичан ослонац. У оба случаја матрице елемената у локалном систему су

идентичне. Једина разлика између једнодимензионалног елемента и еластичног ослонаца је у томе што правац еластичног ослонаца остаје непромењен под дејством спољашњих сила у датом временском кораку, а координата чвора се ажурира. Дакле, ако је модул еластичности довољно велики, тако да се еластични ослонац не деформише под дејством задатих сила, једино могуће кретање чвора 2 биће у правцу нормале на еластични ослонац (Слика 4-9.б). На слици 4-9.в приказан је такође еластичан ослонац, где постоји и могућност моделирања трења, или вискозног отпора. Такође, постоји могућност моделирања ослонаца уз примену других материјалних модела, који ближе апроксимирају биолошко и физиолошко понашање црвених крвних зрнаца (и других ћелија) када се нађу у близини зидова крвних судова.

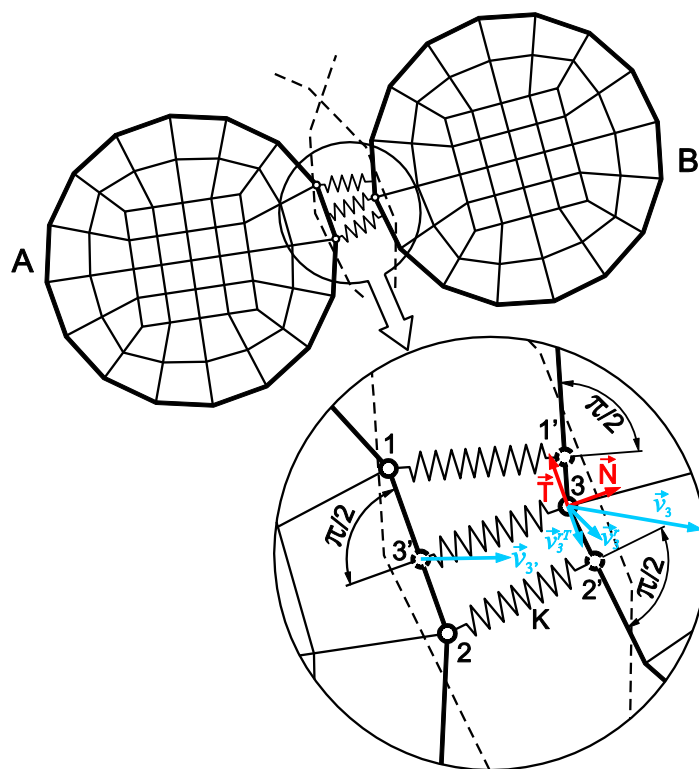
Горе описани концепт еластичних ослонаца примењен је за моделирање интеракције између тела и интеракције тела и зидова крвних судова.



Слика 4-10: Интеракција честице са зидом

На слици 4-10 приказана је једна честица у близини зида. У примени овог концепта усвајамо унапред задату границу до које се честица може приближити зиду. Уколико се неки контурни чвор мреже честице нађе у овој области у било ком временском тренутку, између тог чвора и зида се појављује нови еластични ослонац, чији је правац одређен правом која пролази кроз дати чвор и управна је на зид. Ослонац ће постојати све док је напон у елементу негативан, тј. док је елемент оптерећен на притисак. Уколико се појави затежући напон, елемент више не постоји. Приметимо да једначине које одговарају чвору на зиду не постоје, тако да се при формирању једначина система коначних елемената, увођење фиктивних штапова своди на додавање чланова на левој и десној страни једначина у чвору честице, а који одговарају дејству штапа.

Слично претходном, на слици 4-11 приказан је модел међусобне интеракције два тела. Посматра се свако тело понаособ, и упоређује положај са свим осталим телима. Узмимо као пример тело А. Испитује се да ли било који контурни чвор тела А улази унутар границе интеракције тела Б. Уколико постоји такав чвор, у њему се уводи линијски елемент, чији је правац одређен нормалом на најближи сегмент контуре тела Б. Са слике се види да овај критеријум задовољавају чворови 1 и 2, и у њима су постављени линијски елементи у правцу нормале на најближе сегменте тела Б. Аналогно претходном, испитује се да ли било који чвор тела Б улази унутар границе интеракције тела А. У овом случају чвор 3 задовољава задати критеријум, и у њему је постављен линијски елемент нормалан на сегмент 1-2 тела А.



Слика 4-11: Међусобна интеракција тела

Да би се спречило приближавање тела испод одређеног растојања, потребно је изабрати одговарајући модул еластичности ослонаца. Теоријски, могуће је користити било који модул који је много већи од модула еластичности тела. Међутим, у пракси се показало да појава ослонаца у систему доводи до мале нестабилности, па треба избегавати сувише велике модуле. Зависно од облика тела, брзине кретања, вискозности, и сл. модул еластичности ослонаца треба да се креће у границама $0.1 \div 10.0$ модула еластичности тела.

Као што је раније поменуто, поред нормалних сила које не дозвољавају честицама да се приближе на растојање које је мање од неког унапред дефинисаног, могу се увести и тангенцијалне силе: силе трења и силе вискозног отпора.

Да бисмо дефинисали силе трења и вискозног отпора морамо претходно размотрити кинематику кретања тела. Брзина у тачки 3 тела Б је \mathbf{v}_3 . Брзина у тачки 3' тела А (пројекција тачке 3 на сегмент 1 – 2 тела А) је $\mathbf{v}_{3'}$. Разлика ове две брзине представља релативну брзину тачке 3 у односу на 3':

$$\mathbf{v}_3^r = \mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_{3'} \quad (4.3.48)$$

Сила трења дефинише се као производ нормалне силе и коефицијена трења:

$$F_\mu = -\mu N \text{sign}(v_3^{rT}) \quad (4.3.49)$$

Овде је v_3^{rT} пројекција релативне брзине на правац \mathbf{T} сегмента 1 – 2. Ова сила има правац сегмента 1 – 2. Може се такође узети у обзир вискозни отпор као последица релативног кретања између тела. Пошто је нормална сила интеракције између тела дефинисана преко линијског (еластичног) елемента, онда узимамо само силу вискозног отпора која одговара проклизавању између тела. Дакле, сила вискозног отпора дефинисана је као производ коефицијента отпора и пројекције релативне брзине тачке 3 у односу на тачку 3' на правац тангенте (односно правац сегмента 1 – 2 тела А):

$$F_b = -bv_3^{rT} \quad (4.3.50)$$

Знак минус у једначинама (4.3.49) и (4.3.50) дефинише смер дејства сила. Ове силе су, дакле, супротног смера од смера пројекције релативне брзине на правац тангенте. Утврђено је да су решења нумерички стабилнија ако се у току итерација задржи правац сегмента са почетка корака, док се међусобни положај између тела ажурира током итерација.

Приказани концепт јаког спрезања солида и флуида, уз примену ажурирања мреже флуида у току времена, уграђен је у програмски пакет ПАК [42]. Верификација решења добијених овим програмом урађена је на примерима “пропадања“ диска кроз флуид [32] и кретања диска под дејством сила флуида и гравитационих сила [56]. Резултати добијени коришћењем програма који је развијен према приказаном концепту, дати су у

Додатку Б. С обзиром да су решења добијена овим програмом веома блиска постојећим решењима у литератури, може се сматрати да приказани концепт моделирања солид – флуид интеракције даје поуздана решења. Стога се приказани концепт може применити на решавање сложених проблема кретања тела произвољне геометрије у флуиду чије границе такође могу бити произвољног облика.

Као што је у уводу напоменуто, једна од области у којој се може применити моделирање солид – флуид интеракције јесте истраживање кретања црвених крвних зрнаца и наночестица у крвним судовима. У близини зидова крвних судова брзине струјања су веома мале, па се може сматрати да је профил брзине флуида смичући [48]. У следећем поглављу ће бити приказана студија кретања тела у пољу флуида са константном брзином смицања.

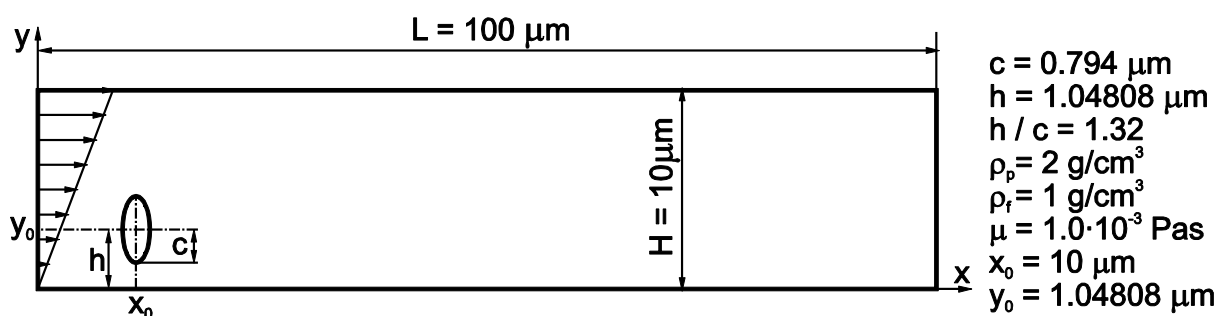
5 Резултати – модели кретања делића у пољу смицајног струјања

У овом поглављу биће представљени примери примене програма PAKSF_Remeshing, развијеног на бази теорије дате у претходном поглављу, а који се односе на кретање делића у флуидном пољу са константном брзином смицања (енг. shear flow).

5.1 Студија кретања тела у пољу са константном брзином смицања

Као што је у претходним поглављима напоменуто, у близини зидова крвних судова брзине струјања су веома мале. При веома малим брзинама струјања могу се занемарити ефекти инерцијалних сила у флуиду. Поред ове апроксимације, у близини зида се може сматрати да профил брзине није параболичан, већ линеаран, јер је сегмент параболе у тој зони веома близак правој линији. Узимајући у обзир ове две апроксимације, флуид се може моделирати применом Стоксове једначине (у којој не постоји члан који одговара инерцијалним силама) са линеарним профилем брзине (односно, са константном брзином смицања).

Први пример који ће бити анализиран представља кретање делића елипсастиг облика у пољу флуида са смичућим профилем. На слици 5-1 су дати геометријски и материјални параметри модела.



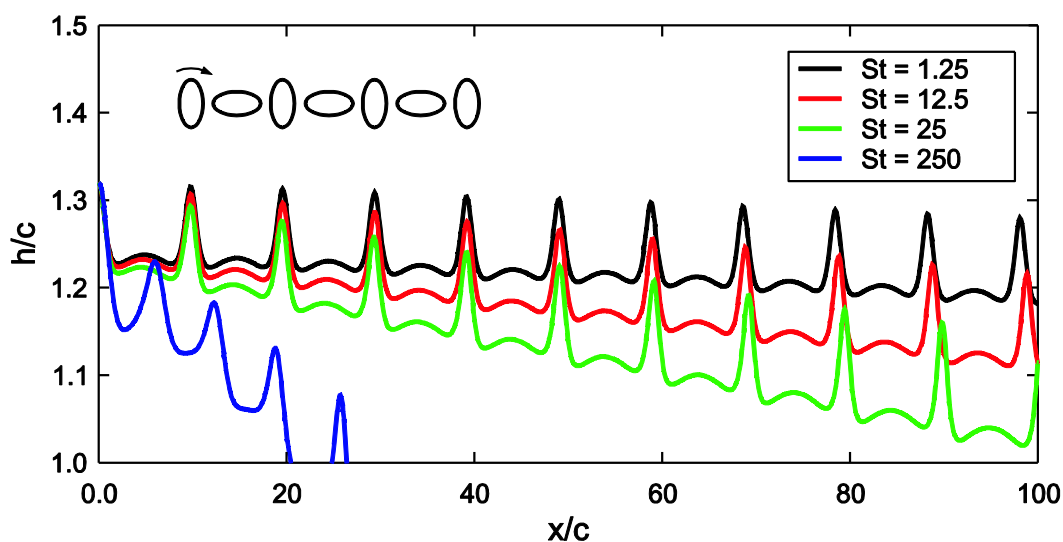
Слика 5-1: Геометријски подаци за модел струјања флуида у пољу флуида са константном брзином смицања

Један од параметара Стоксовог струјања је такозвани Стоксов број. За случај кретања елипсе у флуиду, Стоксов број је $St = \frac{\rho_p c^2 S}{\mu}$, где су: ρ_p - густина честице, c - дужа

полуоса елипсе, S - смичући коефицијент (брзина смичања) и μ - динамичка вискозност. Рејнолдсов број за овај случај струјања је $Re = \frac{\rho_f c^2 S}{\mu}$. Из дефиниција

Стоксовог и Рејнолдсовог броја може се приметити да између њих постоји директна зависност: $St = \frac{\rho_p}{\rho_f} Re$. У овом примеру посматра се кретање честице за четири

различите вредности Стоксовог броја: $St = 1.25$, $St = 12.5$, $St = 25$ и $St = 250$.

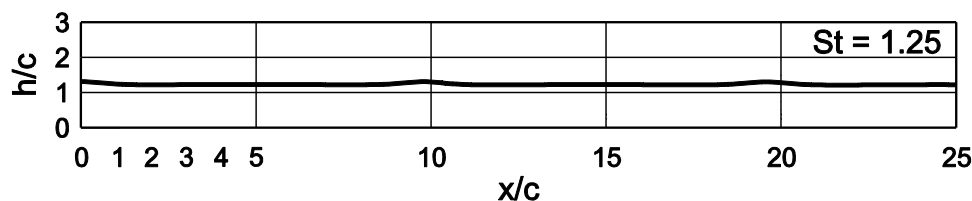


Слика 5-2: Нормализоване путање средшта елипсог делића за четири различите вредности Стоксовог броја: $St = 1.25$, $St = 12.5$, $St = 25$ и $St = 250$; Стоксов модел флуида

На слици 5-2 су дате нормализоване путање тежишта елипсог честице у пољу флуида са смичућим профилем брзине. На апсциси се налази нормализована x координата, а на ординати нормализовано растојање тежишта елипсе од доњег зида. Обе величине су нормализоване већом полуосом елипсе c . Како се са слике може видети, повећањем Стоксовог, односно Рејнолдсовог броја, повећава се и брзина приближавања честице ка зиду. Путање имају периодичан осцилаторни карактер, што је последица елипсог облика делића. Дијаграм нормализованих путања, који је приказан на слици 5-2, има веома сличан карактер постојећим резултатима у литератури [48]. Извесне мање разлике постоје, што се може тумачити као последица примене различитих методологија решавања проблема кретања тела у флуиду.

Међутим, амплитуда ових осцилација је веома мала када се упореди са дужином пута који честица пређе за време док тело ротира један пун круг. На слици 5-3 је илустрован

овај детаљ, тако што је дат део путање за Стоксов број $St = 1.25$, али са истом размером на обе осе ($\frac{x}{c}$ и $\frac{h}{c}$).



Слика 5-3: Дијаграм нормализованих путања са истом размером на апсциси и ординати, Стоксов модел флуида

У табели 5-1 дата је зависност угла скретања делића ка зиду од Стоксовог и Рејнолдсовог броја. Вредност угла је дата у степенима, пошто се ради о веома малим бројевима. За мање вредности Стоксовог броја ($St = 1.25$, $St = 12.5$, $St = 25$), путање су веома блиске хоризонтали. Чак и када је вредност Стоксовог броја $St = 250$ путања не одступа значајније од хоризонтале, угао је само 0.38301° .

Стоксов број	Рејнолдсов број	Угао нагиба путање [$^\circ$]
1.25	0.625	-0.02337
12.5	6.25	-0.05997
25	12.5	-0.10083
250	125	-0.38301

Табела 5-1: Зависност угла нагиба путање у односу на хоризонталу од Стоксовог и Рејнолдсовог броја

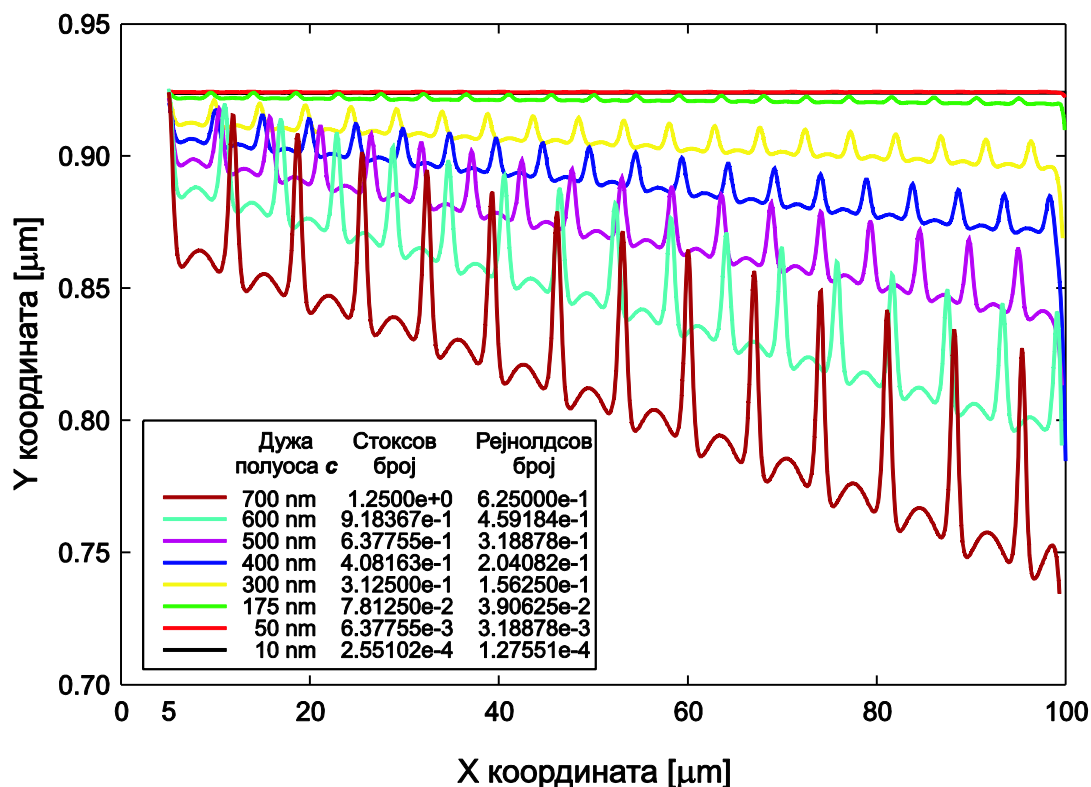
У следећем примеру анализирано је кретање честица различитих димензија у пољу флуида са константном брзином смицања. У табели 5-2 дате су димензије веће полуосе елипсе за све израчунате путање, као и Стоксови и Рејнолдсови бројеви који одговарају појединим димензијама елипсе. Димензија полуосе је у нанометрима.

Већа полуоса елипсе c	Стоксов број	Рејнолдсов број
700	$1.25 \cdot 10^0$	$6.25 \cdot 10^{-1}$
600	$9.18367 \cdot 10^{-1}$	$4.59184 \cdot 10^{-1}$
500	$6.37755 \cdot 10^{-1}$	$3.18878 \cdot 10^{-1}$
400	$4.08163 \cdot 10^{-1}$	$2.04082 \cdot 10^{-1}$
300	$3.125 \cdot 10^{-1}$	$1.5625 \cdot 10^{-1}$
175	$7.8125 \cdot 10^{-2}$	$3.90625 \cdot 10^{-2}$
50	$6.37755 \cdot 10^{-3}$	$3.18878 \cdot 10^{-3}$
10	$2.55102 \cdot 10^{-4}$	$1.27551 \cdot 10^{-4}$

Табела 5-2: Димензије веће полуосе елипсе и одговарајући Стоксови и Рејнолдсови бројеви

На слици 5-4 су приказане путање честица чије су димензије дате у табели 5-2.

Почетни положај тежишта свих честица је исти: $x_0 = 5 \mu m$, $y_0 = 0.924 \mu m$.



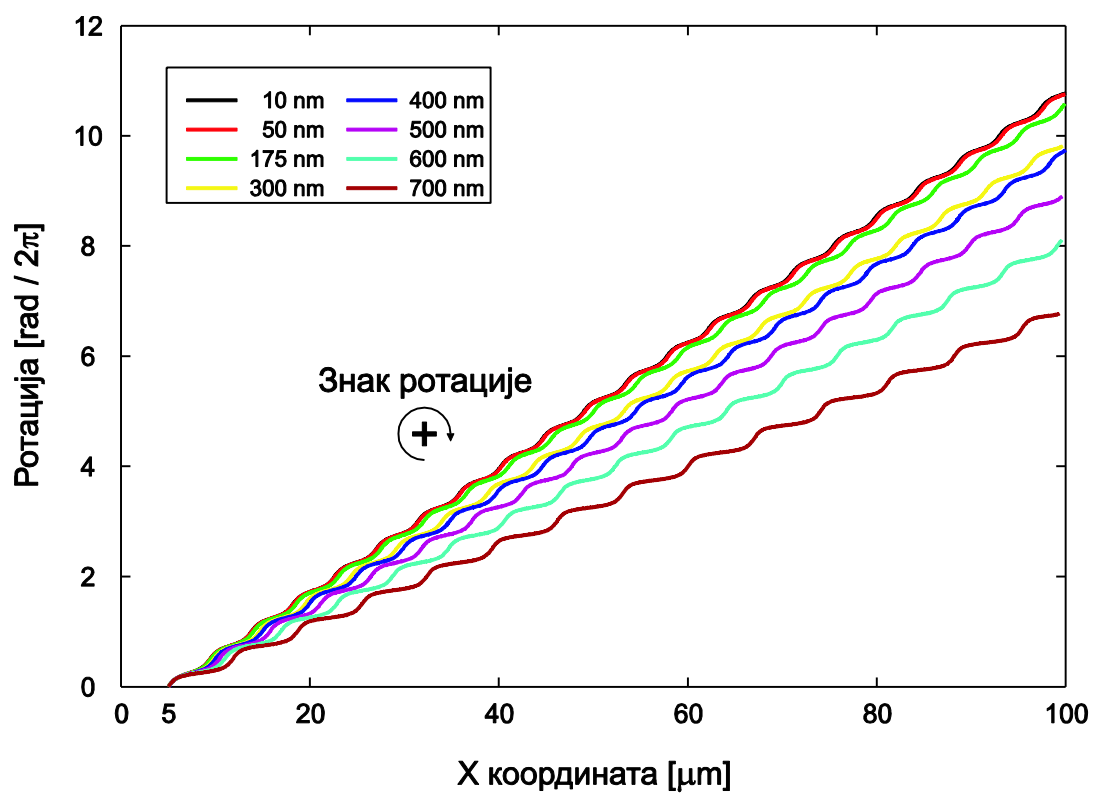
Слика 5-4: Путање честица различитих димензија, Стоксов модел флуида

Смањењем димензија елипсасте честице смањује се њихов угао скретања ка зиду. Такође, са смањењем димензија смањује се и период за који честица обави једну пуну ротацију. У Табели 5-3 дати су углови путања делића. Поново се види да је угао мали, иако визуелно Слика 5-4 показује велике нагибе путања.

Већа полуоса елипсе c	Угао нагиба путање [°]
700	-0.061411
600	-0.050591
500	-0.037429
400	-0.014464
300	-0.011540
175	-0.001339
50	≈ 0
10	≈ 0

Табела 5-3: Зависност угла нагиба путање у односу на хоризонталу од димензија честице

Дијаграм ротација честица дат је на слици 5-5. Интересантно је да се ротације смањују при повећању димензија елипсе, што је последица увећања момента отпора са повећањем димензија.

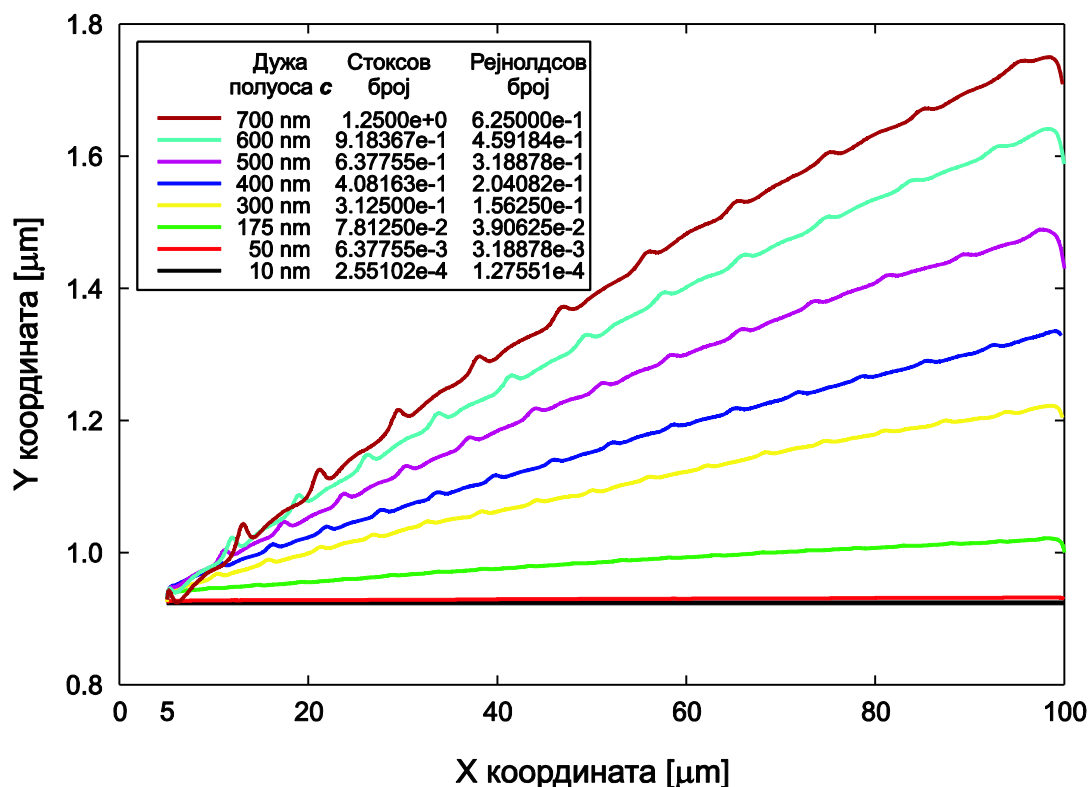


Слика 5-5: Дијаграм ротација честица различитих димензија

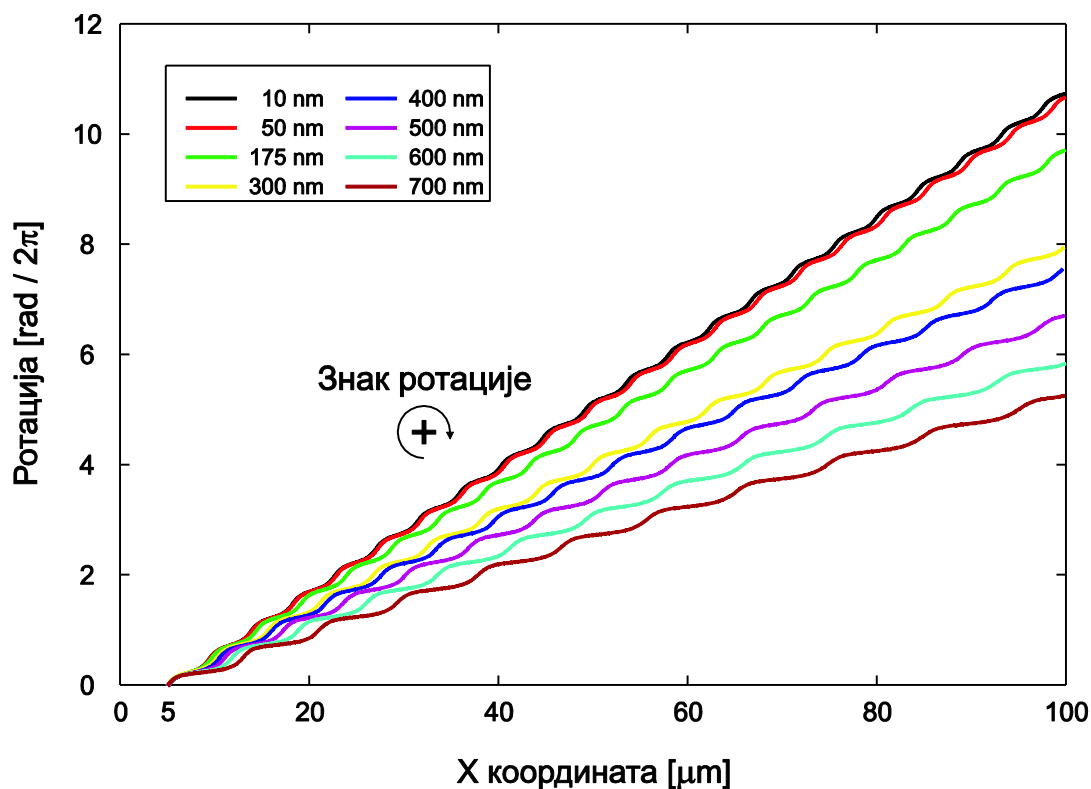
5.2 Применљивост Стоксових и Навије – Стоксових једначина

У претходној секцији је дата анализа кретања елипсастих честица у пољу флуида са константном брзином смицања. У прорачуну је коришћена Стоксова једначина, у којој су занемарени ефекти инерцијалних сила у флуиду. Оваква апроксимација даје довољно тачна решења када су у питању веома мале брзине струјања, односно када се честице налазе у близини зида. Тада су и убрзања веома мала па се инерцијалне силе, које су директно пропорционалне убрзањима, могу занемарити. Међутим, у случајевима када се анализира кретање у крвним судовима, наночестице се могу наћи било где унутар крвног суда. У таквим условима се не може сматрати да Стоксова једначина струјања флуида даје поуздана решења. За општи случај струјања флуида логично је да тачнија решења даје модел са Навије-Стоксовим једначинама. Ова решења биће даље показана.

На сликама 5-6 и 5-7 дате су путање и ротације честица за пример који је претходно разматран, а које су добијене применом Навије-Стоксових једначина. Сви геометријски и материјални подаци су идентични као у претходном примеру, као и корак временске интеграције.



Слика 5-6: Путање честица различитих димензија добијене применом Навије-Стоксове једначине



Слика 5-7: Дијаграм ротација честица различитих димензија добијен применом Навије-Стоксове једначине

Путање добијене применом Навије-Стоксових једначина (слика 5-6) су по карактеру потпуно другачије од путања добијених применом Стоксове једначине (слика 5-4). Такође, на дијаграмима ротација, датих на сликама 5-5 и 5-7 могу се уочити значајне разлике.

Код примене Стоксове једначине, облик путање по којој се честица креће зависи од Стоксовог броја. Варирањем густине солида, смичућег коефицијента, димензија елипсасте честице и вискозности флуида може се увек добити одређени Стоксов број, за који програм даје решења сличног карактера. За разлику од тога, применом Навије-Стоксове једначине и варирањем параметара од којих зависи Стоксов број, добија се увек другачије решење. Разлика у решењу је последица присуства инерцијалних сила у флуиду.

У Табели 5-4 дати су нагиби путања за посматране димензије наноделића. Опет имамо резултат да су нагиби мали, тако да оба модела флуида (Стоксов и Навије-Стоксов) дају путање које су са малим нагибом у односу на зид.

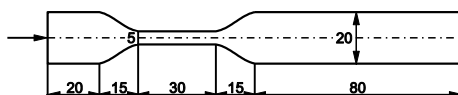
Већа полуоса елипсе c	Угао нагиба путање [°]
700	0.5225230
600	0.4383042
500	0.3386141
400	0.2366302
300	0.1776163
175	0.0504203
50	≈ 0
10	≈ 0

Табела 5-4: Зависност угла нагиба путање у односу на хоризонталу од димензија честице (решења добијена применом Навије-Стоксових једначина)

6 Резултати - моделирање кретања ћелија и делића у крвним судовима и чиповима за сепарацију ћелија

6.1 Кретање у капилару

Посматрамо дводимензионално кретање црвених крвних зрнаца и нано честица унутар капилара са сужењем. Циљ овог модела је да се утврде путање наноделића, који се користе за транспорт лекова, у условима који се срећу у крвотоку. Од облика путања наноделића, њиховог приближавања зидовима крвног суда, зависи ефикасност преноса лекова у ћелије ткива. Овде се посматрају два облика наноделића – кружни и елиптични, да се утврди да ли кретање зависи од њиховог облика.



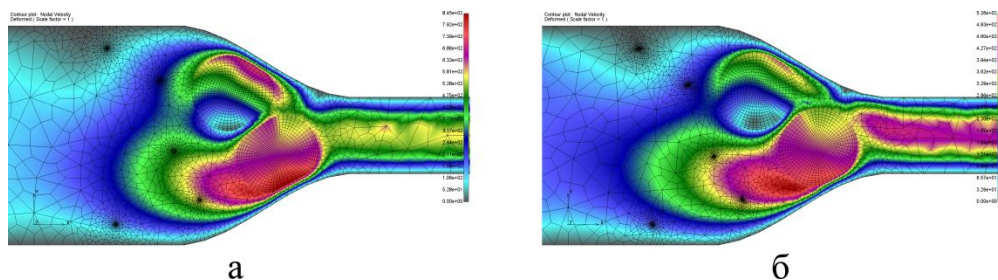
Слика 6-1: Геометрија капилара

Капилар је пречника $20 \mu m$, са сужењем пречника $5 \mu m$. Геометрија капилара је дата на слици 6-1. Два црвена крвна зрнца пречника $7 \mu m$, постављена су на растојању од $10 \mu m$ од улаза. Иза њих налази се пет нано честица симетрично постављених на вертикали која се налази на $2 \mu m$ од улаза. У Табели 1 су дате почетне висине нано честица.

Честица	Почетна висина честице (nm)
1	2.0
2	6.0
3	10.0
4	14.0
5	18.0

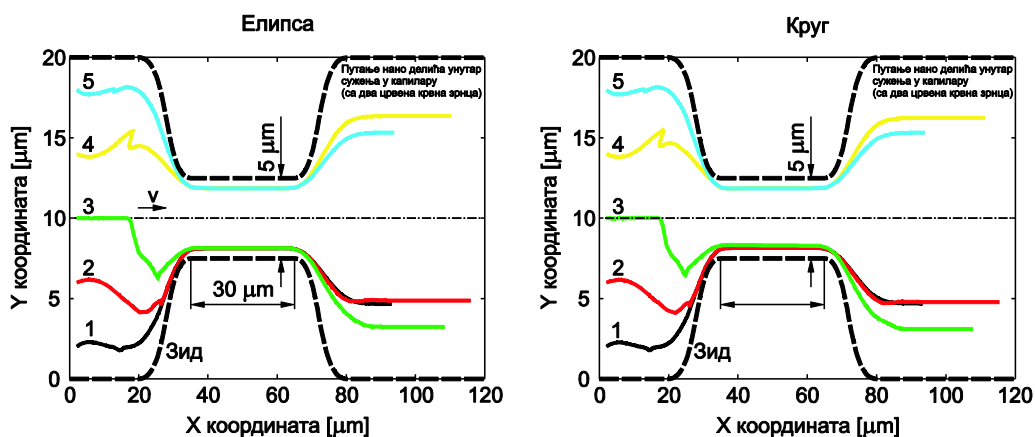
Табела 6-1: Почетни положај нано честица

Посматрамо два случаја (слика 6-2): (а) нано честице су кружног облика, пречника 200 nm ; б) нано честице су елиптичног облика, површине једнаке површини кружних честица, са односом полуоса $a : b = 2 : 1$.



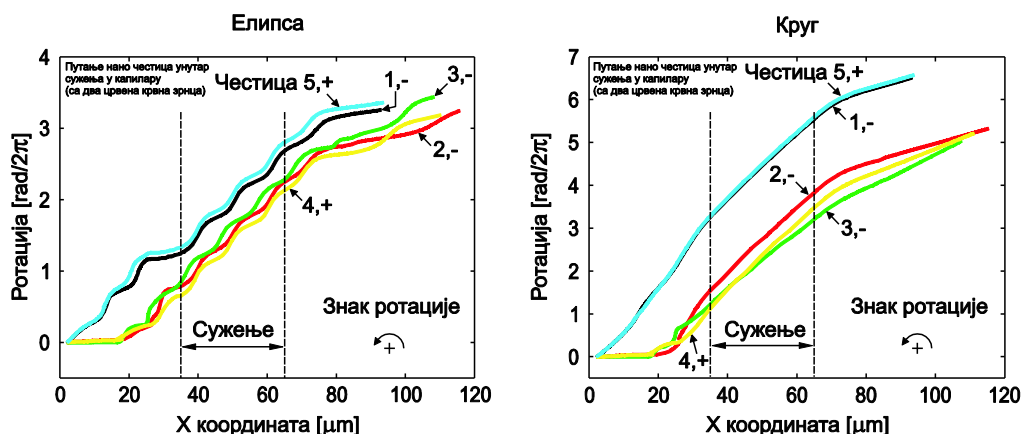
Слика 6-2: Поље брзине флуида и солида у тренутку уласка црвених крвних зрнаца у сужење: (а) позиција кружних честица; (б) позиција елиптичних честица

Црвена крвна зрнаца сматрамо хомогеним еластичним телима, модула еластичности $E = 200 Pa$, густине $\rho_s = 1.01 \cdot 10^3 kg / m^3$ и Поасоновог броја $\nu = 0.49$. Нано честице и зидове крвног суда сматрамо крутим (врло велики модул еластичности). Флуид посматрамо као хомоген вискозан Њутнов флуид, густине $\rho_f = 1.0 \cdot 10^3 kg / m^3$ и динамичке вискозности $\mu = 3.675 \cdot 10^{-3} Pa s$. Брзина флуида на улазу у капилар је $100 \mu m / s$. Профил брзине је правоугаони.



Слика 6-3: Путање нано честица кроз флуид

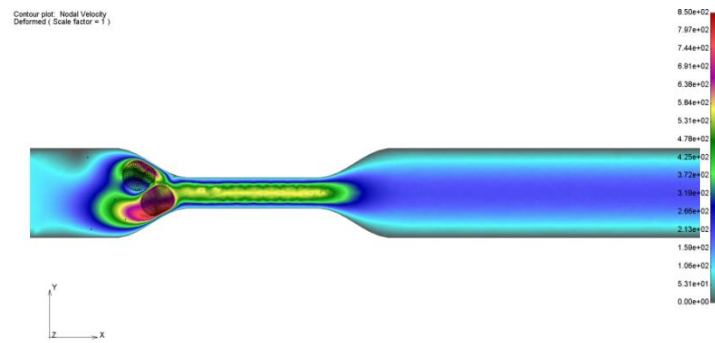
На слици 6-3 приказане су путање нано честица до момента када се црвена крвна зрнаца приближе излазу. Бројевима од 1 до 5 означене су путање појединих честица. Као што се са претходне слике може приметити, путање су практично идентичне за оба типа нано честица. Дакле, облик честица не утиче значајно на њихове путање.



Слика 6-4: Ротације нано честица у флуиду

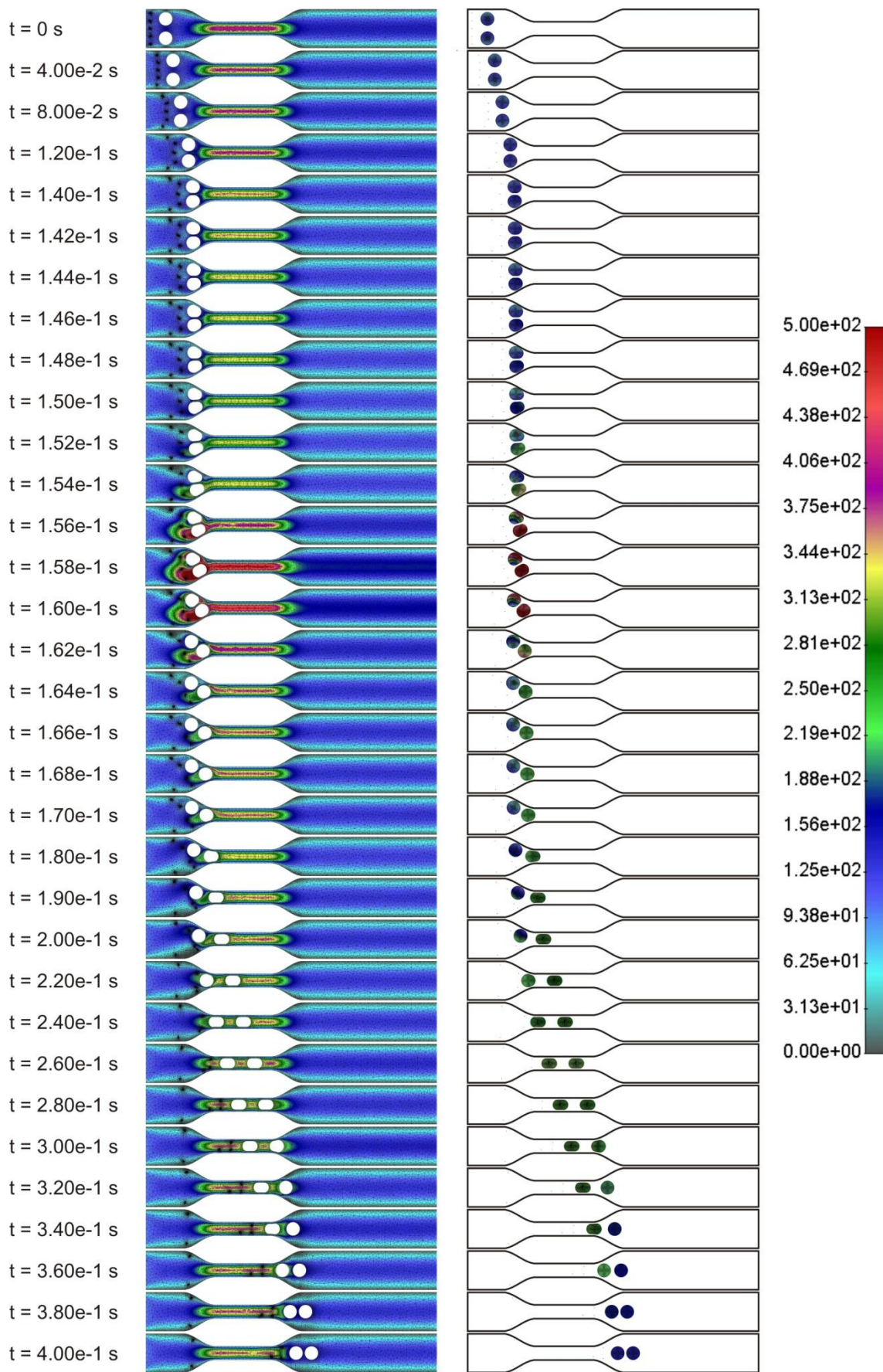
На слици 6-4 приказане су ротације честица у току времена. Као што се на слици види, сматра се да је ротација позитивна уколико је у позитивном математичком смеру. Интересантно је приметити да је ротација елиптичних нано честица много спорија у односу на кружне нано честице. У почетном периоду честице 1 и 5 више ротирају од честица 2, 3 и 4, али се ротација честица 2, 3 и 4 значајно увећава када они уђу у суужење. Ово се може објаснити чињеницом да је ротација изазвана смицањем у флуиду и генерисањем смичућих напона, које је израженије у близини зида. Честица 3, која је у почетном тренутку на оси симетрије, непосредно пре уласка у суужење скреће са осе симетрије. То се догађа услед поремећаја у струји флуида који је изазван међусобном интеракцијом црвених крвних зрнаца у суужењу. Услед скретања са осе симетрије, честица 3 долази у зону ближу зиду крвног суда, где је израженије смицање у флуиду. Отуда долази до ротирања честице 3, које иначе не постоји све док се честица креће дуж осе симетрије.

На слици 6-5 је приказано поље брзина у флуиду и солиду, које је несиметрично због несиметрије у погледу положаја црвених крвних зрнаца.



Слика 6-5: Поље брзина за цео домен флуида и солида

На слици 6-6 шематски је приказан пролазак хелија кроз сужење у капилару.



Слика 6-6: Пролазак хелија кроз сужење у капилару (поља брзина у флуиду и солиду)

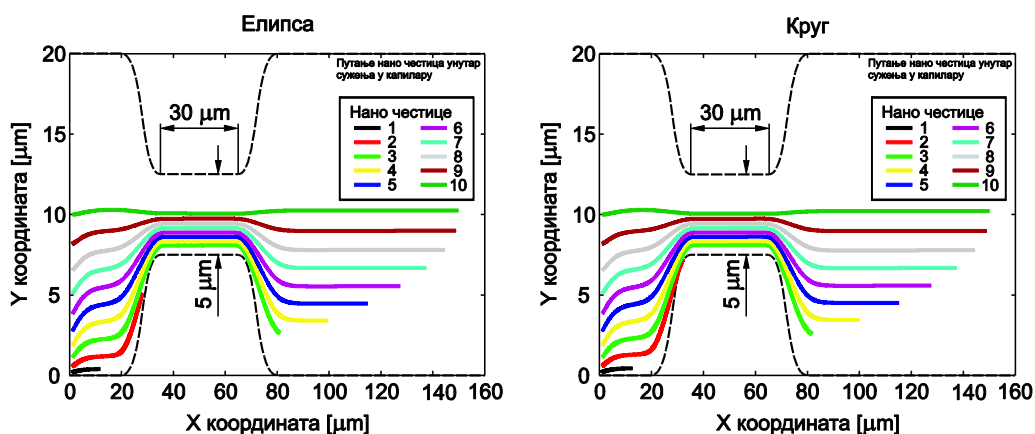
Као што се на претходној слици може видети, приказани су посебно домени флуида и солида са пољем брзина. На левој страни слике дато је време за карактеристичне положаје ћелија. Интересантно је да се ћелије крећу симетрично све до прилаза сужењу, када услед међусобног дејства и малог поремећаја једна ћелија прође испред друге; на крају, у излазном делу ћелије, као еластична тела, добијају првобитни недеформисани облик (деформације су врло мале због малих сила флуида) .

У следећем примеру анализиране су путање десет нано честица у капилару са сужењем, а без црвених крвних зрнаца. Геометрија флуидног домена је иста као у претходном примеру. Десет нано честица је постављено на истој вертикали која се налази на растојању од $1 \mu m$ од улаза. Удаљење честица од доњег зида капилара налазе се у табели 6-2. Остали геометријски и материјални параметри су исти као у претходном примеру.

Честица	Почетна висина честице (nm)
1	0.2000000000
2	0.5629629630
3	1.1074074074
4	1.8333333333
5	2.7407407407
6	3.8296296296
7	5.1000000000
8	6.5518518519
9	8.1851851852
10	10.0000000000

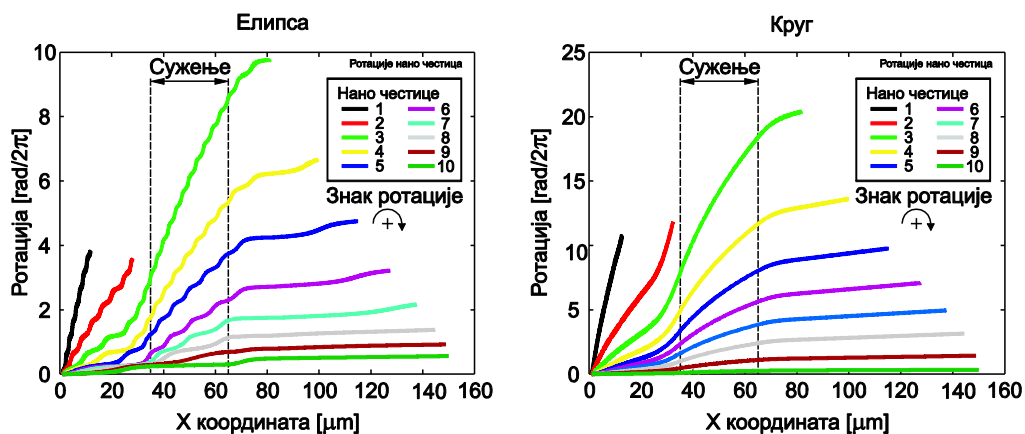
Табела 6-2: Почетни положај нано честица

Као и у претходном примеру, облик нано честица не утиче на путање (Слика 6-7).



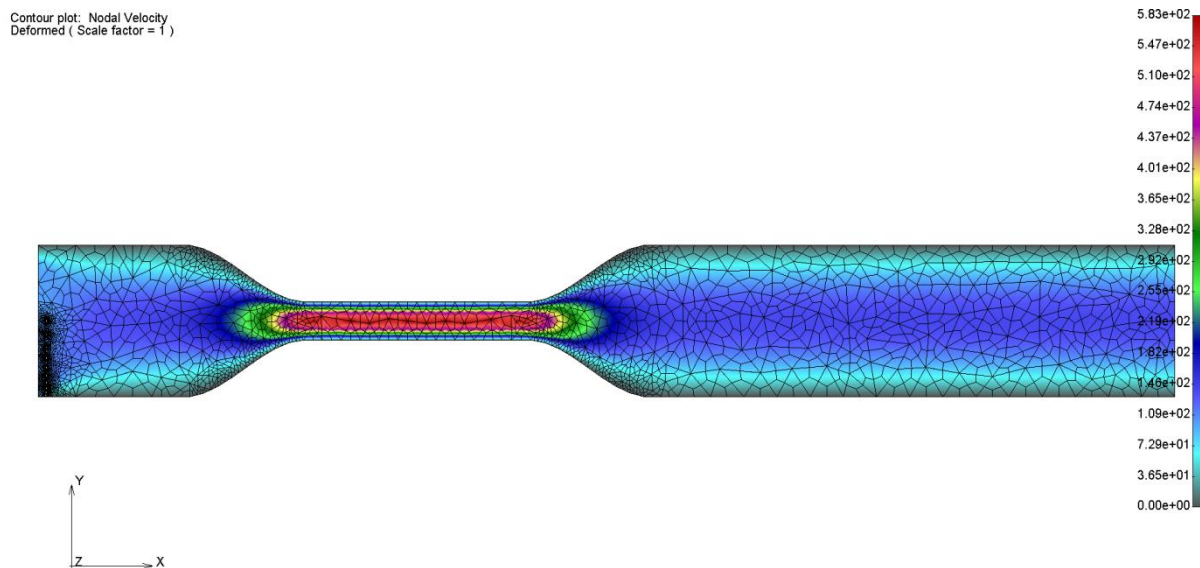
Слика 6-7: Путање нано честица у флуиду

Такође, као и у претходном примеру, постоји значајна разлика у броју ротација нано честица (Слика 6-8).



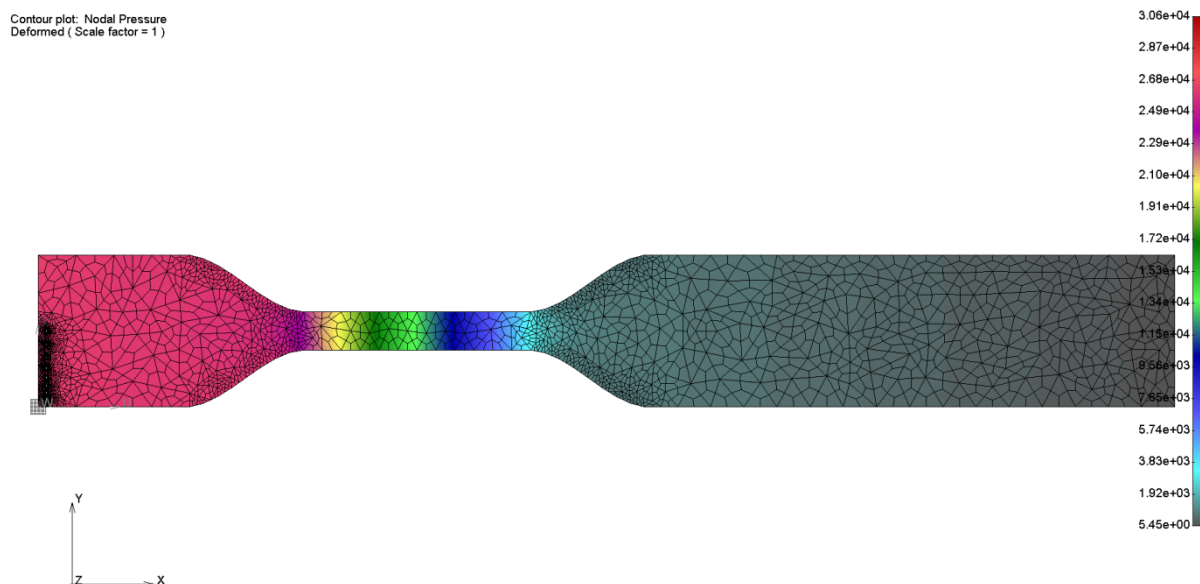
Слика 6-8: Ротације нано честица у флуиду

На слици 6-9 приказана је неструктурна мрежа коначних елемената и поље брзина у флуиду. На улазу у капилар се може приметити изузетно велика густина мреже, која је последица димензија нано честица.



Слика 6-9: Поље брзина у флуиду са мрежом коначних елемената у тренутку $t = 0$ s

На слици 6-10 приказано је поље притиска у флуиду у тренутку $t = 0$ s, које има скоро униформни карактер у појединим сегментима капилара, осим на улазу где се налазе наноделићи.



Слика 6-10: Поље притиска у флуиду са мрежом коначних елемената у тренутку $t = 0$ s

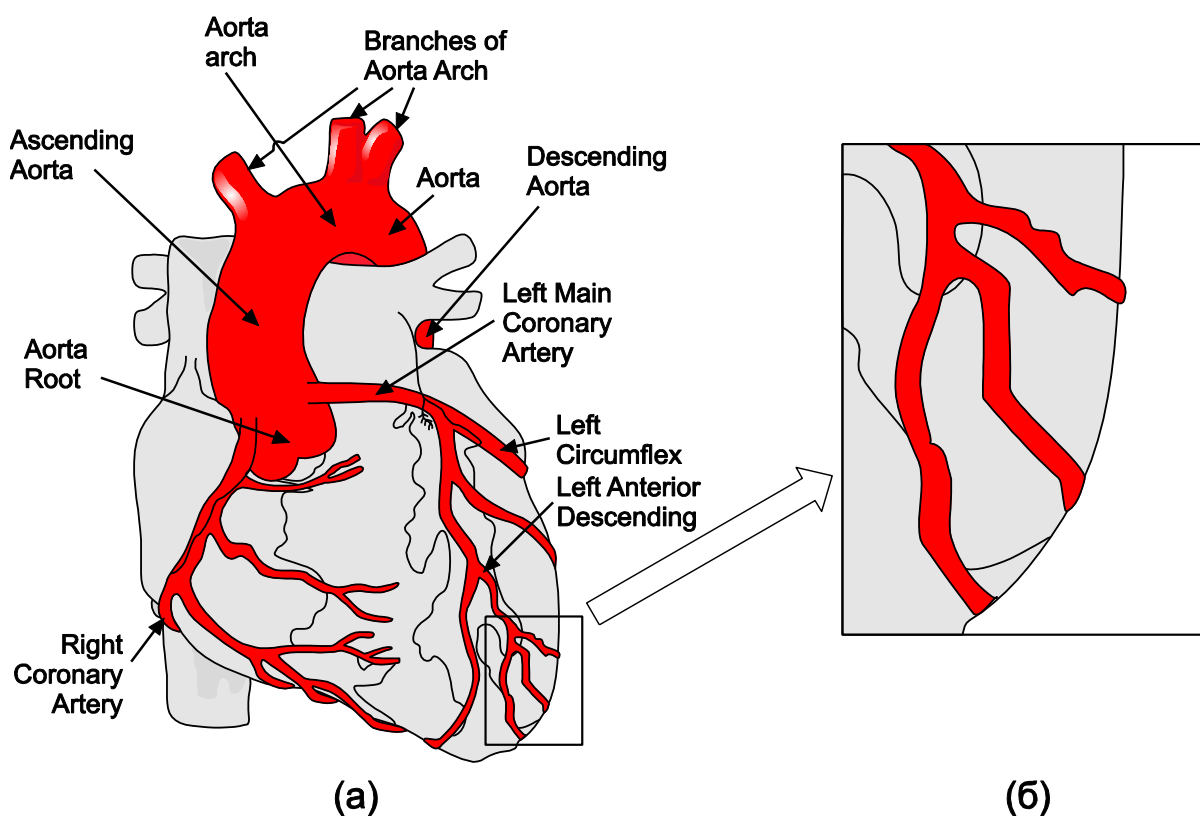
Резултати који су добијени указују на то да облик нано честица не утиче значајно на путање по којима се крећу кроз флуид. Уочене разлике у ротацијама нано честица, које

се јављају у току кретања, не утичу на преносну брзину кретања честица. Овакве карактеристике кретања, исте путање а различите ротације (значи и различито време контакта са истим делићима флуида) може имати значај у практичној примени наноделића као носиоца лекова кроз крвоток до ћелија ткива.

6.2 Кретање у артеријама

Као што је у уводу напоменуто, у случају струјања крви у великим крвним судовима (као што су аорта, абдоминална аорта, феморална артерија, итд.) димензије ћелија су занемарљиво мале у односу на димензије попречног пресека крвних судова. Међутим, у неким мањим артеријама или артериолама, може бити интересно видети какве су путање крвних ћелија, на којим местима долази до агрегације на зидовима, итд.

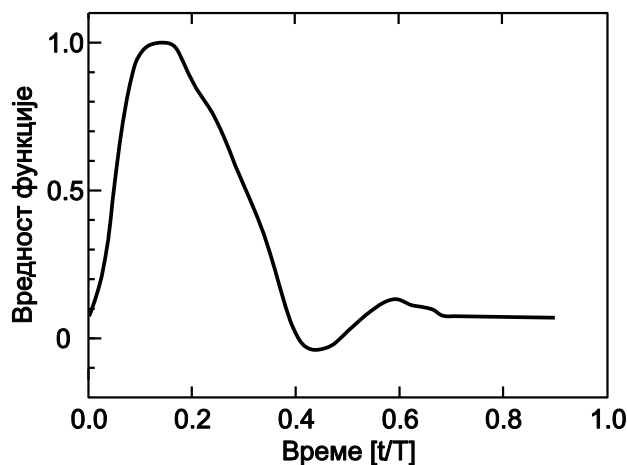
Овде ће бити приказан пример кретања ћелија у коронарним артеријама. Димензије попречног пресека коронарних артерија су реда величине милиметра (до 5 mm) а димензије ћелија су реда величине микрометра (пречник црвених крвних зрнаца је око $8\ \mu\text{m}$). На слици 6-11.а је дат шематски приказ срца са коронарним артеријама.



Слика 6-11: (а) Шематски приказ срца са коронарним артеријама [39]; (б) Сегмент који се моделира

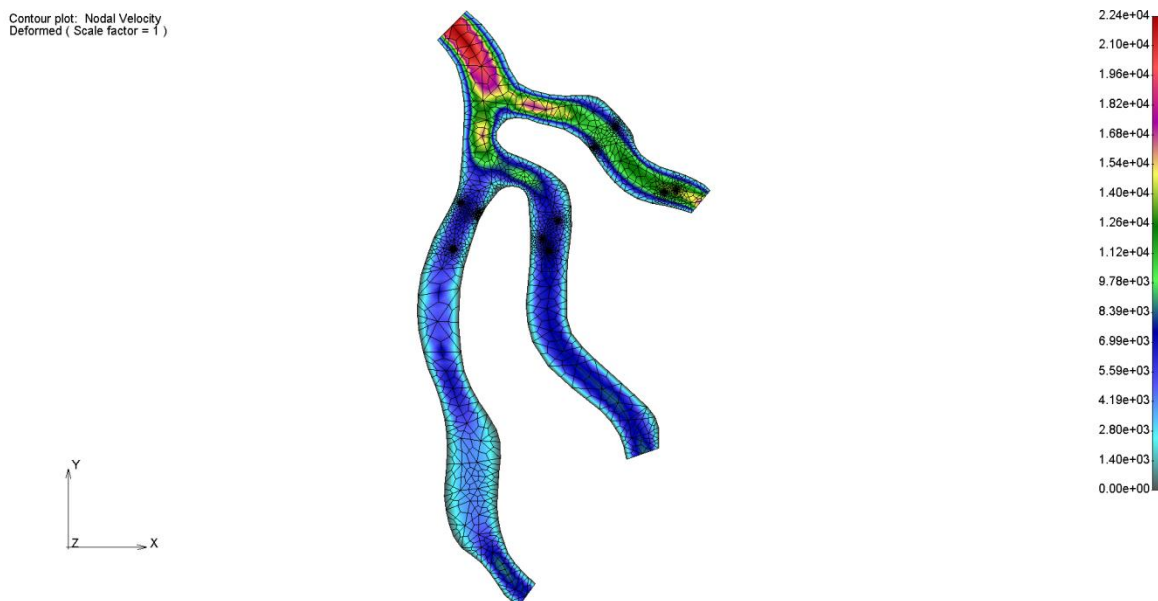
На слици 6-11.б приказан је сегмент коронарних артерија који се моделира. На улазу се задаје брзина струјања, која се у току времена мења према функцији приказаној на слици 6-12. Као што се са слике може видети, функција је нормализована, и у пиксу систоле има вредност 1. Вредност на апсциси је нормализована временом трајања

једног срчаног циклуса. Максимална вредност брзине у пику систоле је око 20 cm/s [5]. Та вредност се множи са задатом временском функцијом.



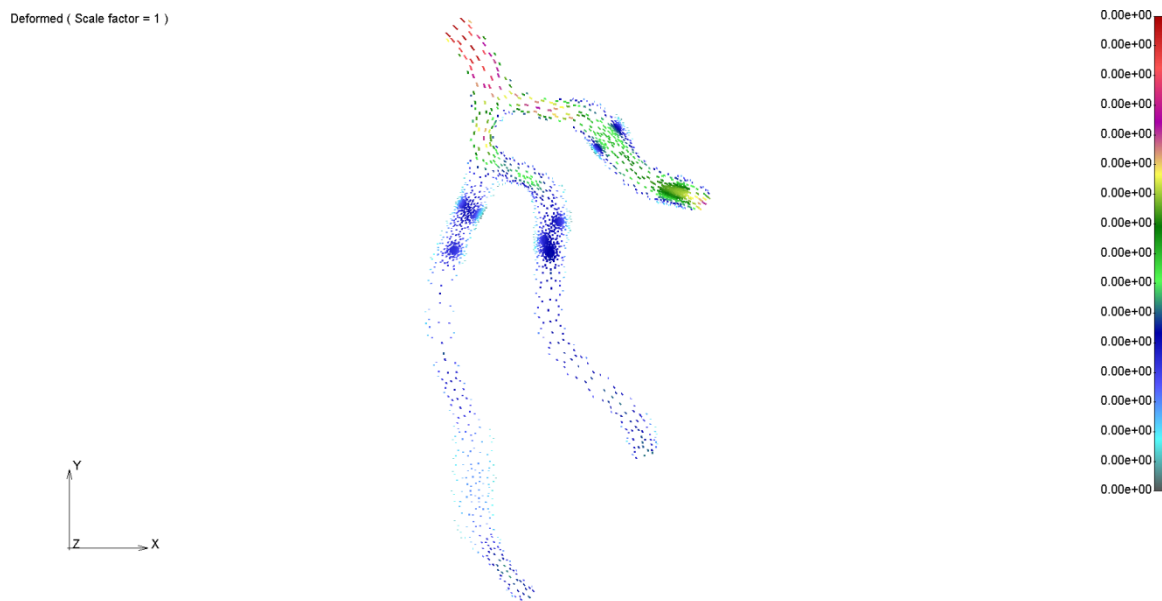
Слика 6-12: Временска функција промене брзине струјања

Непосредно поред улазног пресека на коме је задата брзина струјања, налази се десет симетрично распоређених ћелија у пољу флуида. Пречник ћелија је $8 \mu\text{m}$ (одговара пречнику црвених крвних зрнаца). У примеру су коришћени следећи материјални параметри: густина флуида $\rho_f = 1.0 \cdot 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$, динамичка вискозност $\mu = 3.675 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$, густина ћелија $\rho_s = 1.01 \cdot 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$, модул еластичности ћелија $E = 30 \text{ Pa}$, Поасонов коефицијент $\nu = 0.49$.



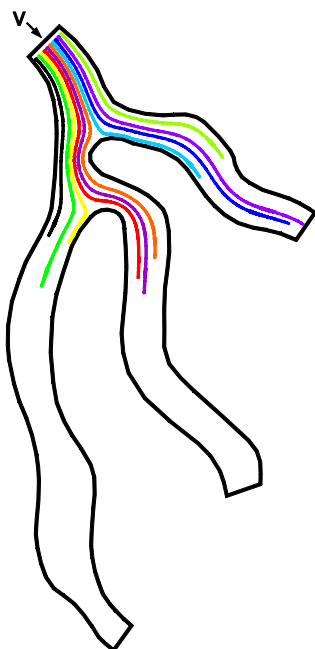
Слика 6-13: Скаларно поље интензитета брзине у коронарној артерији

На слици 6-13 приказано је поље брзина (интензитет), док је на слици 6-14 приказано векторско поље брзина.



Слика 6-14: Векторско поље брзина у коронарној артерији

На слици 6-15 приказане су трајекторије хелија дуж којих се крећу кроз коронарне артерије.



Слика 6-15: Трајекторије хелија

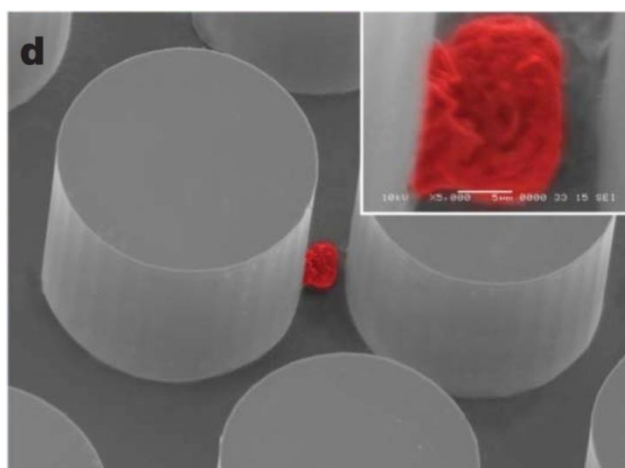
Из ове анализе се може видети разлика не само у облику путања ћелија, већ и њихов различит пређени пут за исти временски интервал. Ови резултати указују на могућност детаљног изучавања кретања ћелија у артеријама, са везивањем за крвни суд и другим феноменима од интереса за медицину (везивање ћелија за зид је показано у следећем примеру).

6.3 Модели кретања ћелија у чиповима за сепарацију ћелија

Развој савремене технологије израде уређаја за тестирање крви у великој мери је утицао на смер истраживања у области раног откривања разних врста малигних обољења.

Ранија клиничка истраживања су показала да се код пацијената који су оболели од неке врсте тумора у врло раним фазама у крви појављују такозване циркулишуће ћелије тумора [29]. То су малигне ћелије које се одвајају од примарног тумора, које путем крви доспевају до здравих делова тела (метастаза). Откривањем тумора у раној фази може се у великој мери спречити даљи раст и развој тумора као и појава метастаза.

Последњих година све више пажње се посвећује изради тзв. микрофлуидних чипова (енг. microfluidic chip). Ови уређаји се користе за тестирање врло мале количине крви. Крв се пропушта кроз микро – уређај у коме се обавља сепарација (раздвајање) ћелија. На слици 6-16 приказан је микроскопски снимак унутрашњости једног микрофлуидног чипа. Чип је практично једна минијатурна комора која је испресецана преградама између којих струји крв која се тестира. Унутрашњост чипова је обложена слојем антитела која имају способност везивања малигних ћелија. Сепарација ћелија се обавља у прецизно контролисаним условима ламинарног струјања.



Слика 6-16: Микроскопски снимак унутрашњости микрофлуидног чипа [68]

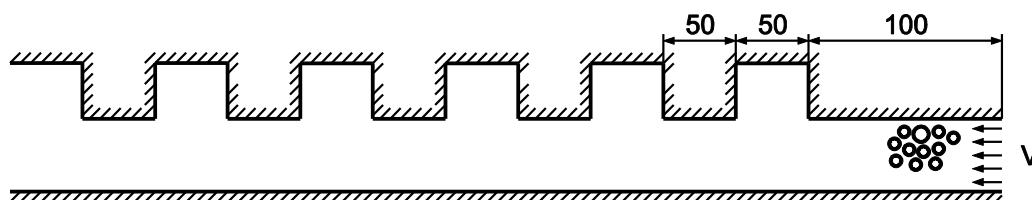
Применом микрофлуидних чипова могуће је из веома малог узорка утврдити да ли у крви постоје малигне ћелије. На тај начин је омогућено рано откривање малигних обољења. Ова метода је далеко мање инвазивна од класичне биопсије, која

подразумева хируршку интервенцију над пацијентом. Микрофлуидни чипови се могу користити и за праћење стања пацијената код којих је већ откривен неки малигни тумор, и који су већ у фази лечења. Периодичним тестирањем њихове крви може се детаљно пратити концентрација малигнућ ћелија у крви, и на тај начин одлучивати о даљим фазама лечења, тј. дозирању цитостатика који се користе за спречавање раста и развоја малигнућ ћелија.

Моделирањем кретања ћелија у чиповима може се значајно унапредити дизајн чипова, јер експериментални резултати дају само резултат сепарације, док се моделом чипа може стећи увид и у сам процес сепарације.

Овде се анализирају две врсте чипова – један се заснива на издвајању ћелија у канале путем привлачних сила од антитела, а код другог се ћелије издвајају на основу крутости.

Чип са антителима на зиду. На слици 6-17 је приказана геометрија уздужног пресека једног модела чипа за сепарацију. У зидовима чипа се налазе канали који су обложени слојем антитела. Интеракција антитела и малигнућ ћелија је моделирана привлачним силама. Димензије модела дате су на слици 6-17.



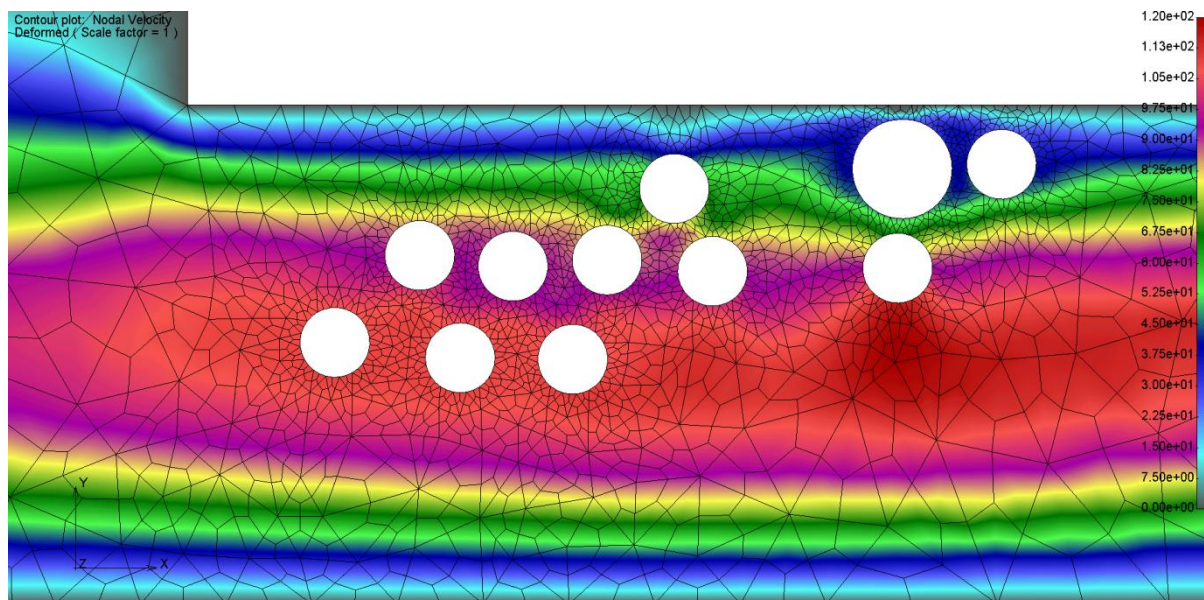
Слика 6-17: Уздужни пресек микрофлуидног чипа

Димензије модела су у микрометрима. Модел садржи 11 ћелија, од којих су 10 пречника $d = 7\mu m$ а једанаеста ћелија има пречник $d = 10\mu m$. Већа ћелија представља модел малигне ћелије. Између ње и зида постоји привлачна сила, која се креће у опсегу од 0 до $5000 fN$, у зависности од броја чворова који се налазе у зони утицаја привлачних сила. Привлачне силе се моделирају по истом принципу као и одбојне, али се у систему једначина не задају крутости већ само силе. Растојање на коме делују привлачне силе мора бити веће од растојања на коме делују одбојне силе, да не би дошло до прекида флуидног домена. У овом примеру растојања за привлачне и одбојне силе су 3 и $1\mu m$, респективно.

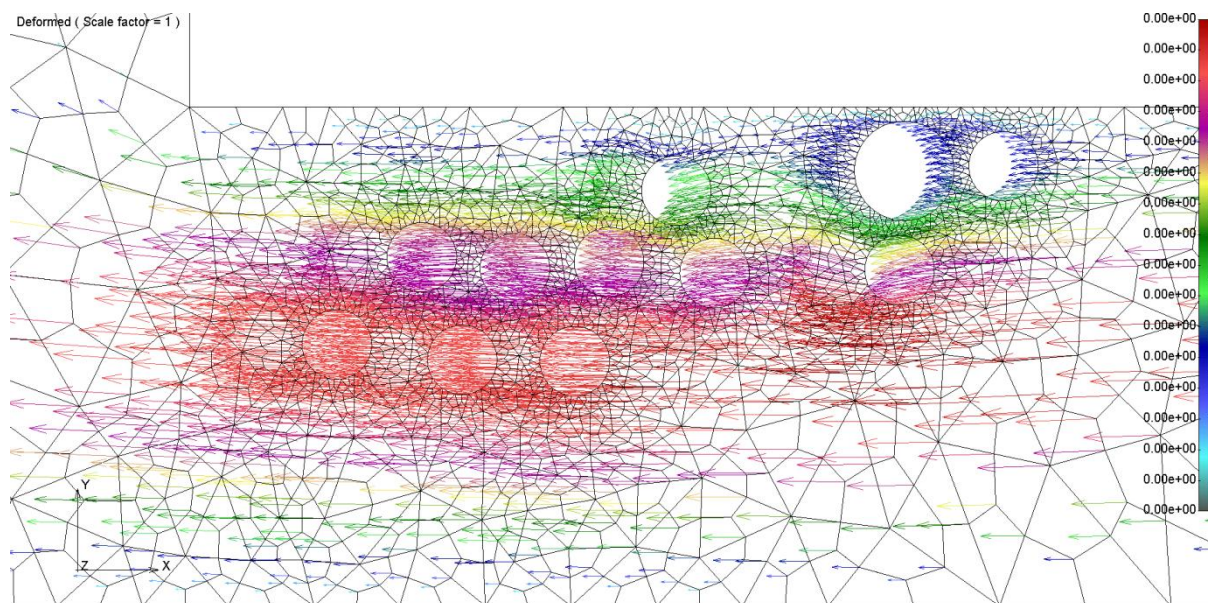
Материјалне карактеристике су: модул еластичности здравих ћелија $E = 1.0 Pa$; модул еластичности малигне ћелије $E = 10.0 Pa$; густине флуида и солида су $\rho_f = 1.0 \cdot 10^3 kg / m^3$ и $\rho_s = 1.01 \cdot 10^3 kg / m^3$ респективно; динамичка вискозност флуида је $\mu = 3.675 \cdot 10^{-3} Pa s$.

Пошто се за одговарајућа антитета знају експериментални подаци о величинама привлачних сила, моделирањем експеримента са тим задатим силама се може утврдити које су оптималне брзине струјања флуида у чиповима за сепарацију. Урађени су прорачуни са три реда величине улазних брзина: $v = 10 \mu m / s$, $v = 100 \mu m / s$ и $v = 1000 \mu m / s$. Прорачуном је установљено да при брзинама 10 и 100 $\mu m / s$ долази до лепљења малигне ћелије за зид, док при брзинама од 1000 $\mu m / s$ малигна ћелија пролази кроз цео модел. На сликама 6-18 до 6-25 су приказана поља брзина у флуиду за различите положаје ћелија (скаларно поље интензитета брзина и векторско поље брзина) за случај када је улазна брзина $v = 100 \mu m / s$.

На сликама 6-18 и 6-19 су дата поља брзина за време $t = 2s$. Тела се крећу практично паралелно са зидом.

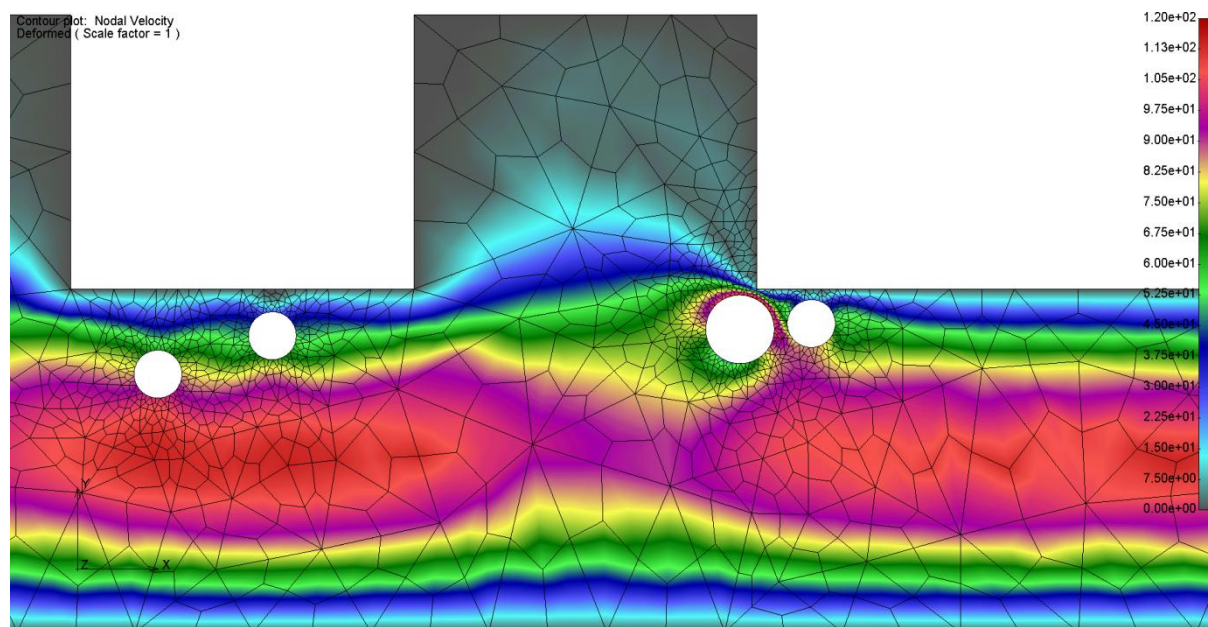


Слика 6-18: Поље интензитета брзина за време $t = 2s$

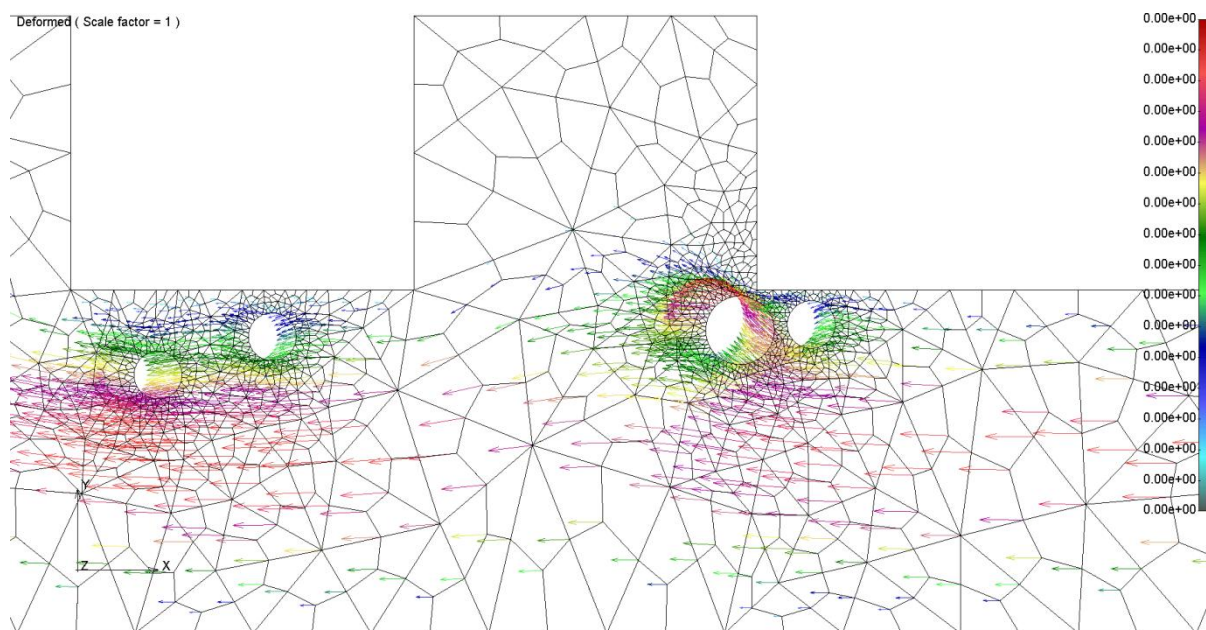


Слика 6-19: Векторско поље брзина за време $t = 2s$

На сликама 6-20 и 6-21 су приказана поља брзина у тренутку $t = 11s$ када малигна хелија долази до првог проширења.

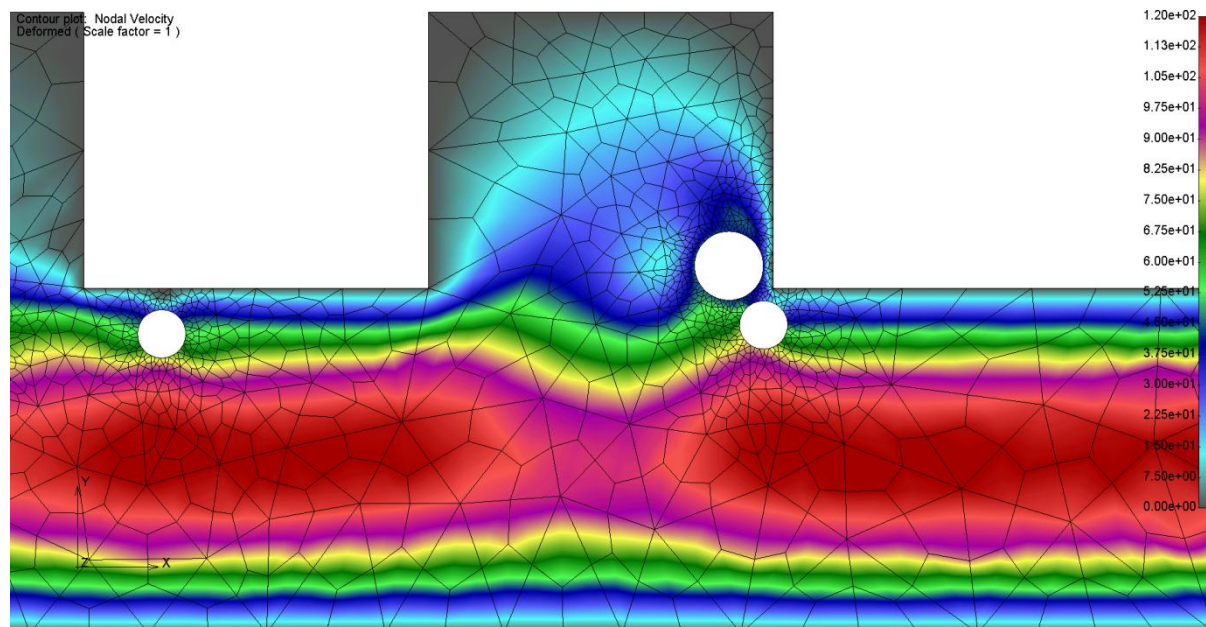


Слика 6-20: Поље интензитета брзина за време $t = 11s$

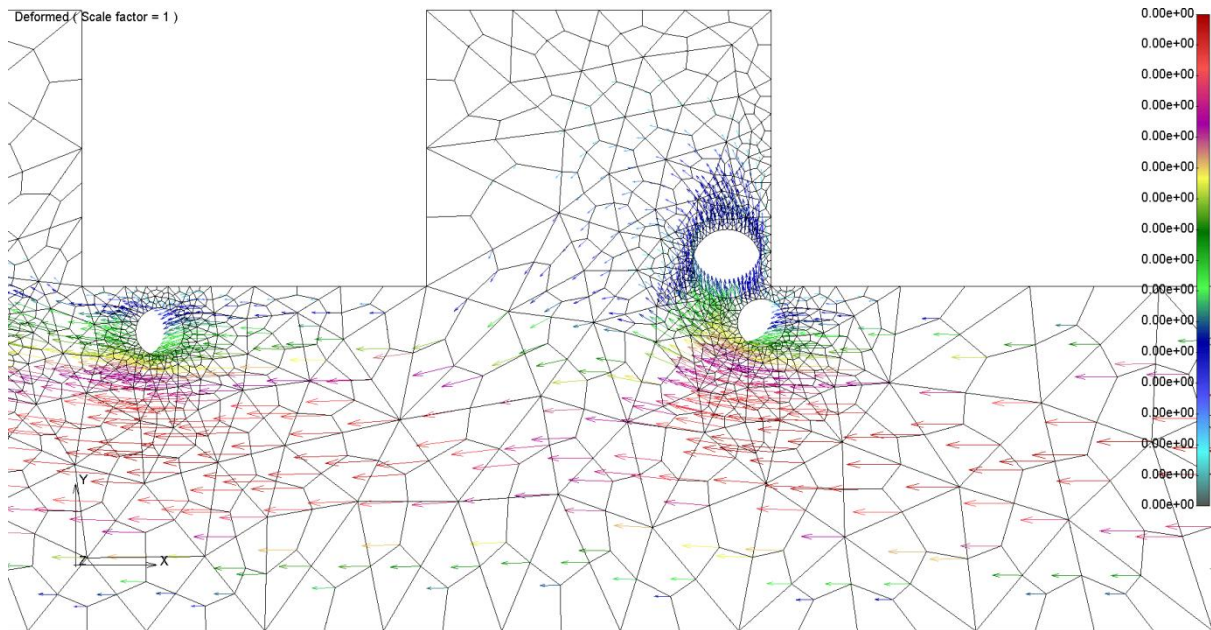


Слика 6-21: Векторско поље брзина за време $t = 11s$

На сликама 6-22 и 6-23 приказан је улазак малигне хелије у канал који се налази на горњој површини чипа. Интересантно је видети како изгледа векторско поље брзина у проширењу (слика 6-23).

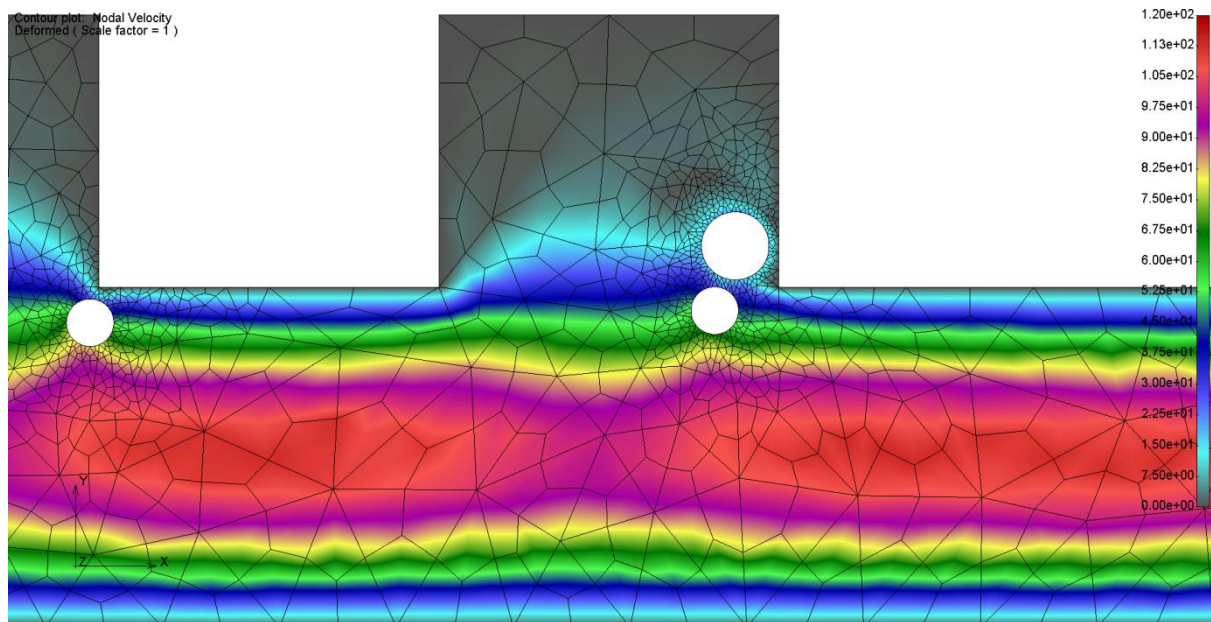


Слика 6-22: Поље интензитета брзина за време $t = 12s$

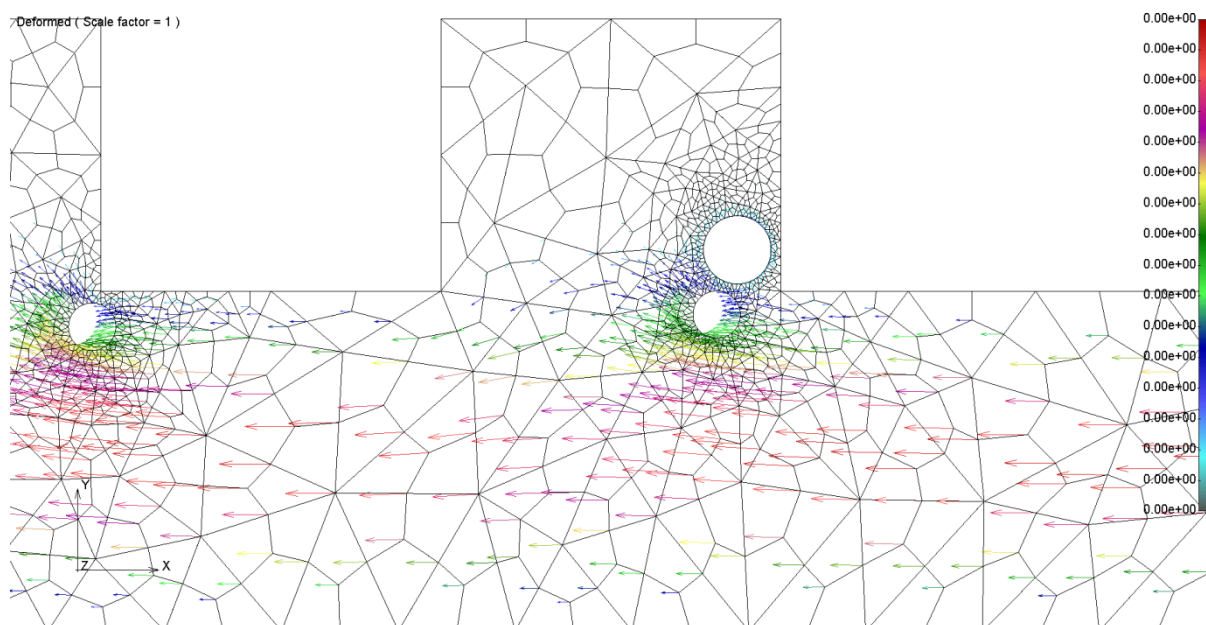


Слика 6-23: Векторско поље брзина за време $t = 12s$

На сликама 6-24 и 6-25 приказана су поља брзина за време $t = 14s$, када је малигна хелија већ закачена за зид проширења чипа.

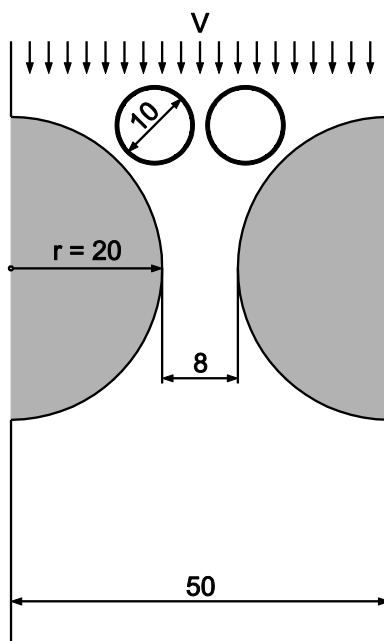


Слика 6-24: Поље интензитета брзина за време $t = 14s$

Слика 6-25: Векторско поље брзина за време $t = 14s$

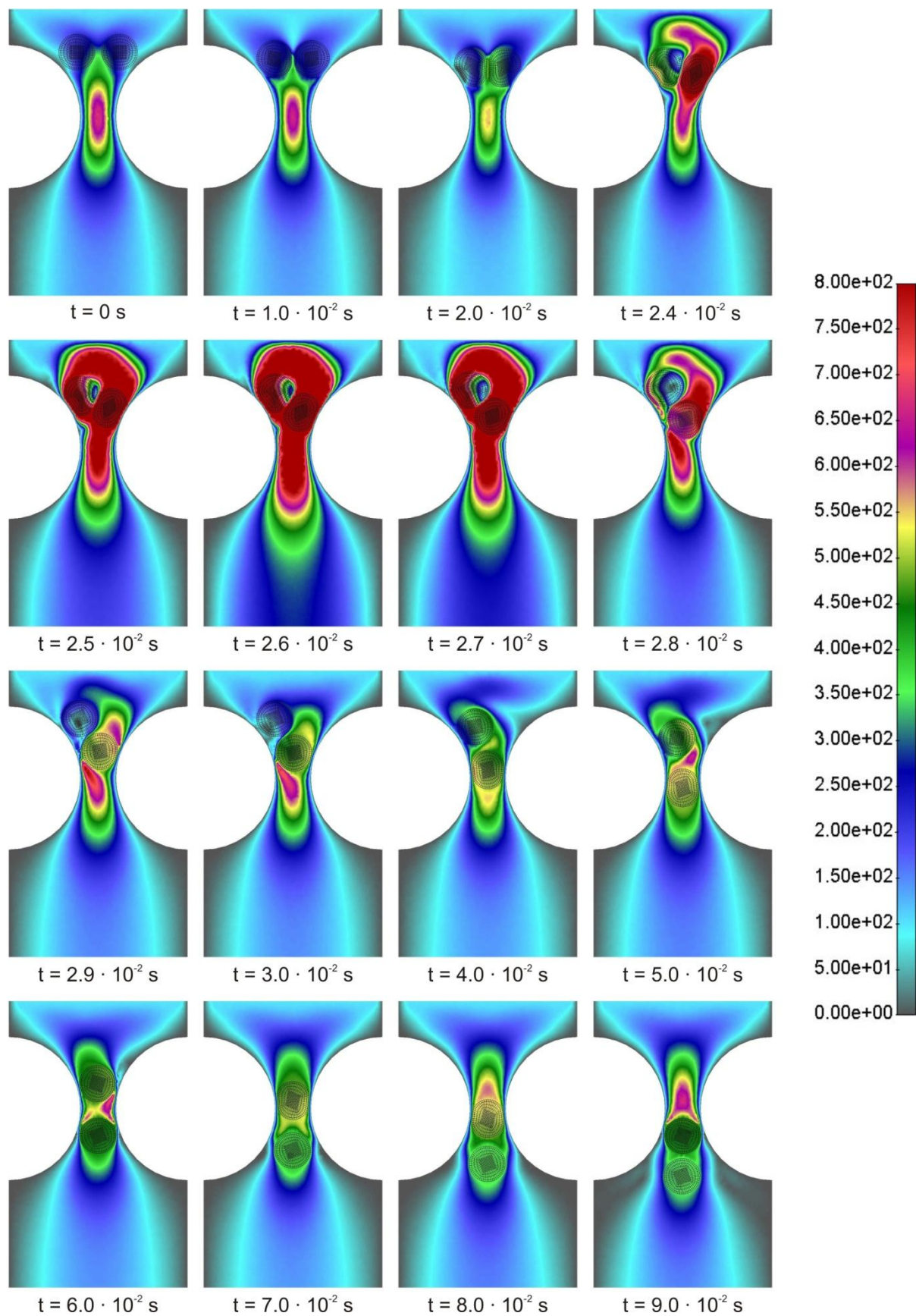
Чип за сепарацију на основу крутости ћелија. Малигне ћелије имају већу крутост од здравих ћелија [47], [67]. Пошто су димензије ћелија познате, могуће је пројектовати чип са преградама тако да сужење између преграда буде мање од пречника ћелија. Величина сужења је таква да здраве ћелије могу да се деформишу и прођу кроз сужење, док малигне ћелије, које имају већу крутост од здравих ћелија, не могу да прођу кроз сужење. Ово је, такође, један од начина на који је могуће обавити сепарацију ћелија.

На слици 6-26 је приказана геометрија једног сегмента чипа који се користи за сепарацију ћелија према њиховој крутости. Димензије модела су дате на слици 6-26. Материјални параметри за солиду су: модул еластичности $E = 200Pa$, Поасонов коефицијент $\nu = 0.49$, густина $\rho_s = 1.01 \cdot 10^3 kg/m^3$. Материјалне карактеристике флуида су као за људску крв: густина флуида $\rho_f = 1.0 \cdot 10^3 kg/m^3$, динамичка вискозност $\mu = 3.67 \cdot 10^{-3} Pa \cdot s$. Улазна брзина флуида је $v = 100 \mu m/s$.



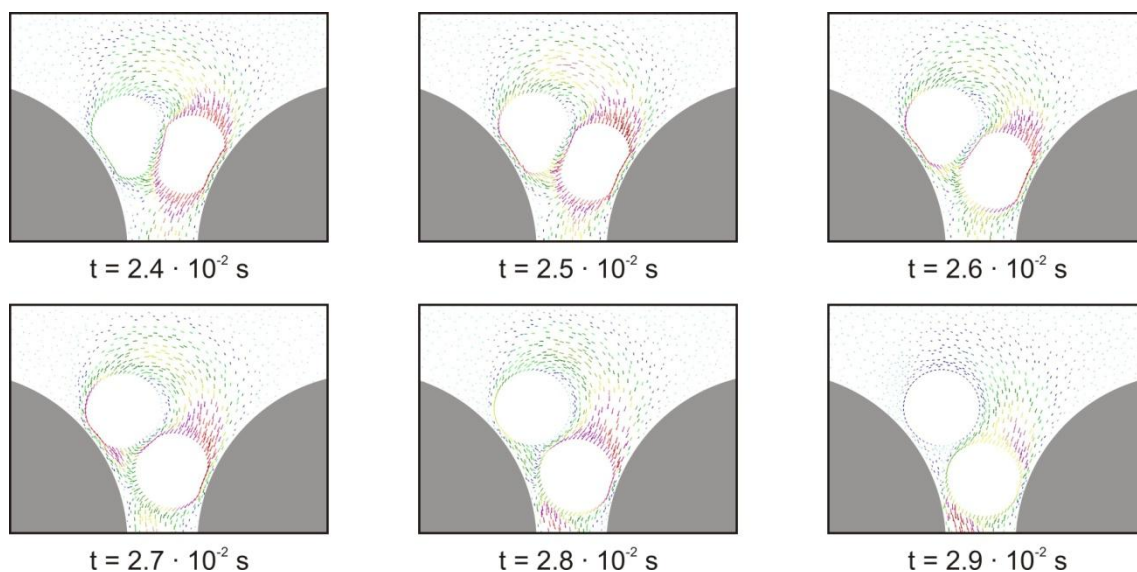
Слика 6-26: Геометрија чипа за сепарацију ћелија на основу крутости

На слици 6-27 приказан је пролазак ћелија кроз један сегмент микрофлуидног чипа.



Слика 6-27: Пролазак две хелије једнаких крутости кроз чип за сепарацију

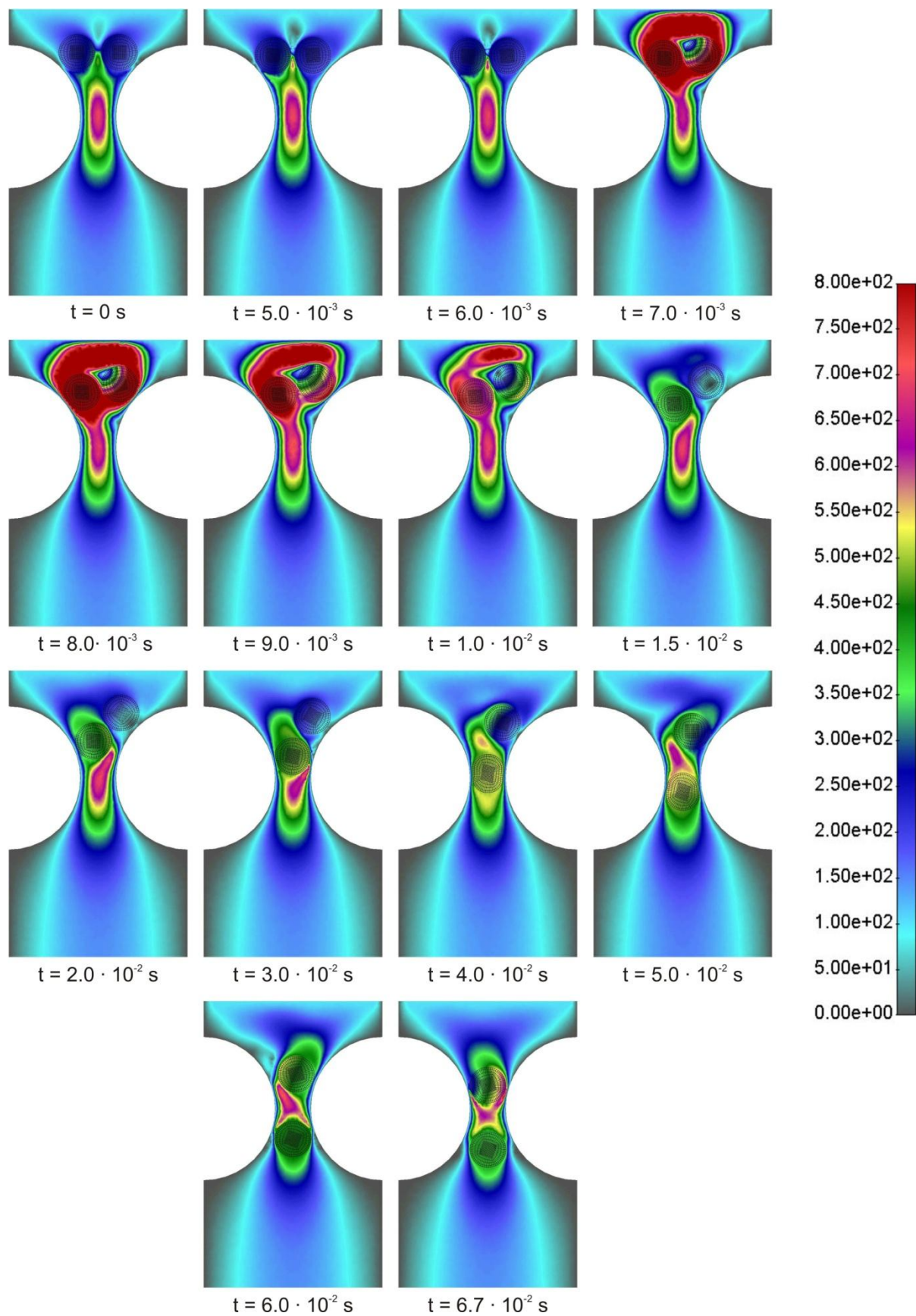
Интересантно је видети како изгледају вектори брзина за случај када се две ћелије истовремено нађу у сужењу. Ћелије се до тренутка $t = 2.0 \cdot 10^{-2} s$ крећу паралелно. Од тог момента почињу да улазе у сужење. Од $t = 2.0 \cdot 10^{-2} s$ до $t = 2.4 \cdot 10^{-2} s$ ћелије улазе у сужење паралелно, а затим се једна од ћелија пробија испред друге, због појаве благе несиметрије у брзинама флуида. На слици 6-28 су приказана векторска поља за период од $t = 2.4 \cdot 10^{-2} s$ до $t = 2.9 \cdot 10^{-2} s$.



Слика 6-28: Вектори брзина у флуиду за случај када ћелије имају исте материјалне карактеристике

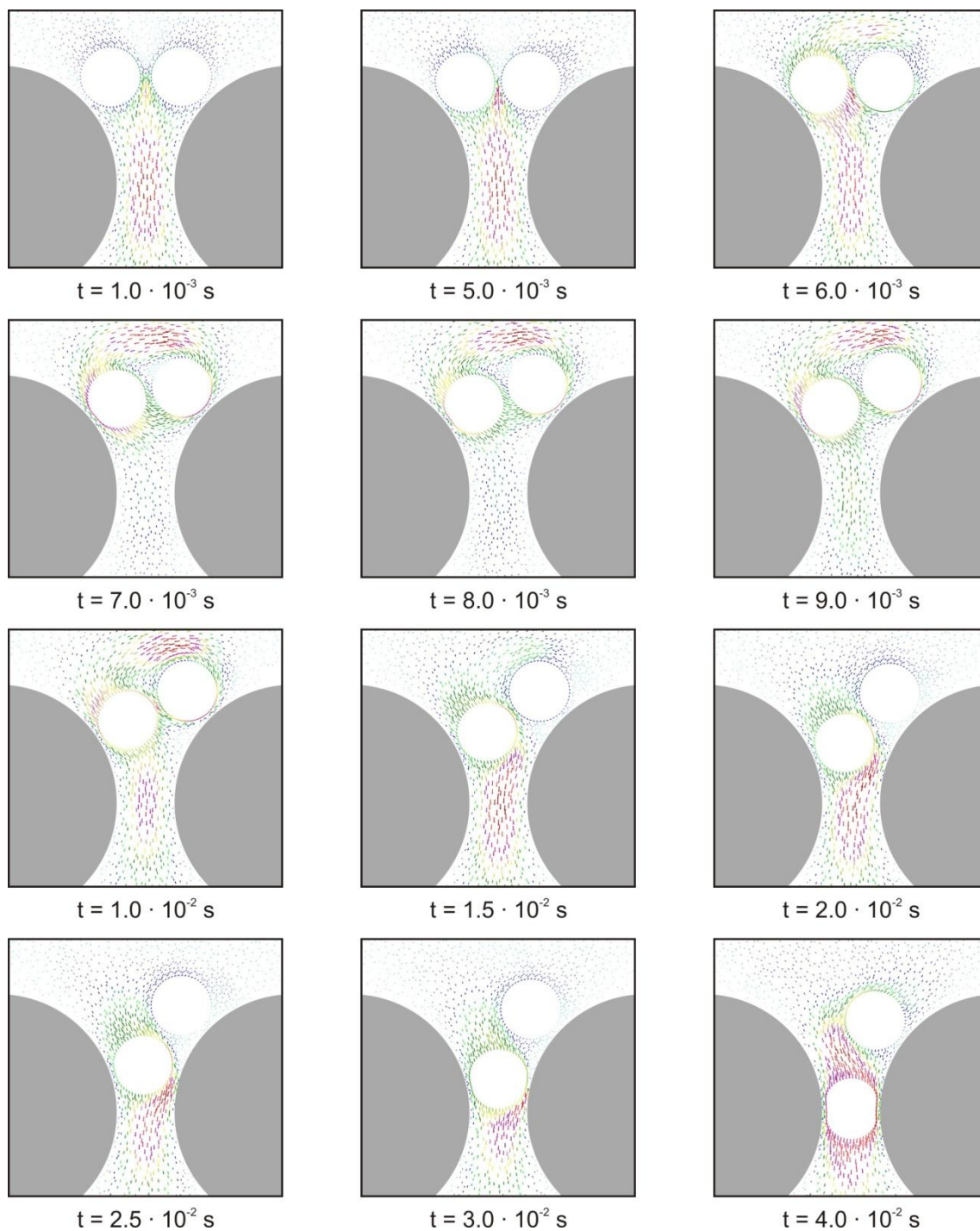
У следећем примеру је коришћена иста геометрија као у претходном, исти гранични услови и материјални параметри флуида. Материјал једне ћелије је исти као у претходном примеру, а материјал друге ћелије има 100 пута већи модул еластичности.

На слици 6-29 се може приметити разлика у деформисању ћелија. Мекша ћелија се деформише и она прва улази у сужење, кроз које затим и пролази. Друга ћелија, која има већи модул еластичности долази до сужења, али се не деформише. Силе којима флуид делује на ову ћелију нису довољно велике да би изазвале деформисање. Због тога друга ћелија не може да прође кроз сужење.



Слика 6-29: Пролазак две хелије различитих крутости кроз микрофлуидни чип

На слици 6-30 је приказано векторско поље брзина за поједине временске тренутке.



Слика 6-30: Вектори брзина у флуиду за случај када хелије имају различите материјалне карактеристике

7 Закључци

Кретање тела у флуиду је веома сложен инжењерски проблем. Ова врста проблема среће се у различитим областима истраживања: у авио индустрији, индустрији прераде целулозе, транспорту чврстих материја флуидом, у спортовима са лоптом, али и у биолошким системима као што је кретање хелија у крви. Проблем интеракције солида и флуида је веома сложен. Узимањем у обзир интеракције између тела која се крећу у флуиду, проблем постаје још сложенији.

У овом раду су приказани различити концепти моделирања солид – флуид интеракције методом јаког спрезања. У четвртом поглављу изложени су детаљи примене различитих методологија за решавање проблема солид – флуид интеракције методом јаког спрезања. Ни једна од методологија описаних у четвртој глави није дала решење за које се може сматрати да да је поуздано у погледу тачности и нумеричке стабилности.

Проблеми који су се појавили приликом програмске имплементације ових метода су генерално слични. Појава нестабилности у флуиду услед генерисања великих вредности чворних сила у флуиду је један од најчешћих проблема који се јављао у тестирању разматраних методологија.

Додатни проблем код Ојлерове формулације настаје у пресликавању померања са мреже флуида на мрежу солида. Ово пресликавање даје извесну нумеричку грешку, која се манифестује у облику пикова у пољу брзина у флуиду. Пикови се временом увећавају, што проузрокује и појаву великих сила, увећаних деформација солида, великих напона у солиду, итд.

Код методе потопљене границе (Immersed boundary method), као доста коришћене у литератури, такође се јављају пикови у брзинама флуида. Присуство запреминских сила интеракције између флуида и солида, на којима је базирана методологија, такође доводи до нумеричке нестабилности. Код ове методе није задовољен ни закон о конзервацији масе, а нема ни експлицитног коришћења једначине равнотеже солида.

Метода јаког спрезања са ажурирањем мреже у сваком кораку је једина методологија која је дала тачне резултате. У цео концепт ове методологије уграђена су бројна

оригинална решења, као на пример динамичко моделирање интеракције између тела помоћу фиктивних линијских елемената са одбојним и привлачним силама.

Предности ове методе су бројне:

- Може се моделирати произвољна геометрија домена флуида.
- Комплетна геометрија домена флуида дефинисана је једним полигоном и граничним условима везаним за темена и странице полигона. Дакле, веома је једноставно направити улазне геометријске податке за флуид.
- Могуће је моделирати интеракцију у којој су укључена тела солида различитог реда величине (на пример: ћелије које су реда величине микрометра и нано честице које су реда величине нанометра).
- Могуће је моделирати кретање крутих и деформабилних тела у флуиду. За моделирање крутих тела довољно је само повећати модул еластичности до вредности која је довољно велика да силе флуида не изазивају деформације солида.
- Архитектура програма је таква да се веома једноставно могу применити алгоритми за паралелно решавање система једначина на умреженим компјутерима високих перформанси. Тиме је омогућено да се програм користи за проблеме са великим бројем ћелија и нано делића (неколико десетина до неколико стотина ћелија или нано делића).
- На једноставним тест примерима се показало да је алгоритам мање осетљив на величину временског корака интеграције у односу на друге истраживане методологије.
- Веома је једноставно имплементирати било који нелинеаран материјални модел за солид, који би се ближе апроксимирало понашање биолошких ткива (хипереластични и вискоеластични материјални модели, модели који описују понашање меких ткива [62], [66], [70]).
- Аналогно претходном, једноставно се могу доградити нелинеарни биолошки материјални модели за једнодимензионалне елементе који се користе за узајамну интеракцију између ћелија као и интеракцију ћелија са зидом. Овакви материјални модели могу бити ближа апроксимација физиолошких процеса који се догађају на ћелијском нивоу.

- Границе просторне интеграције домена флуида и домена солида су јасно раздвојене. Запремински интеграл по домену солида и домену флуида се не преклапају, што је у потпуности у складу са физичком интерпретацијом проблема.

Поред бројних предности, постоје и извесни недостаци:

- У садашњој верзији програма могу се моделирати само дводимензионални проблеми. Да би се решавали тродимензионални проблеми, потребно је применити неки од алгоритама за генерисање тродимензионалних мрежа коначних елемената.
- Тела солида не могу да се додирну зато што се за такве геометријске услове не може направити мрежа флуида. Из истог разлога тела не смеју да додирну зид (односно, спољашњу контуру солида). Зато је у програму уведено минимално дозвољено растојање. Додир тела би захтевао значајну промену алгорита за генерисање нове мреже коначних елемената, што далеко прелази циљеве и задатке овог рада.
- Систем једначина садржи једначине солида и једначине флуида. Решавање оваквог система је процесорски захтевније у односу на независно решавање система једначина флуида и система једначина солида.
- Примена генератора неструктурних мрежа омогућава реализацију приказаног концепта, и даје решења задовољавајуће тачности. Међутим, проблем може настати уколико се анализирају неке величине које се добијају постпроцесирањем резултата. Типичан пример је израчунавање смичућег напона у флуиду, на основу кога се могу доносити закључци о могућим појавама тромбозе. Структурне мреже дају задовољавајуће резултате за смичући напон, док код неструктурних мрежа на резултат значајно утиче облик мреже.
- Корак временске интеграције не може бити произвољан. На вредност временског корака у великој мери утиче дискретизација солида. Величина померања тела у једном временском кораку не би требало да буде већа од дужине ивица контурних елемената солида. Уопштено гледано, то не мора да буде проблем, али тестирањем програма установљено је да се може догодити да се због превеликог померања у једном кораку не може остварити конвергенција. Разлог за то је тешко са сигурношћу утврдити, али једно од могућих објашњења

је релативно груба интерполација брзина и притисака у флуиду у околини честица.

- Приликом моделирања кретања честица различитих редова величине у крви, као што је на пример кретање крвних ћелија и нано-честица за лечење рака, временски корак се мора прилагодити према делићима који су мањег реда величине. Последица овога је доста дуго трајање прорачуна код ове врсте проблема, јер честице већег реда величине за време једног временског корака прелазе веома мала растојања у односу на своје димензије.

Резултати који су приказани у петом поглављу указују на чињеницу да облик нано делића не утиче значајно на путање по којима се нано делићи крећу у крвним судовима. У близини зидова крвних судова брзине струјања су веома мале, тако да су инерцијалне силе занемарљиве. У том случају, за моделирање кретања ћелија у крви могуће је користити Стоксову једначину за струјање флуида, која не садржи инерцијални члан. Међутим, Стоксова једначина није применљива на општи случај струјања флуида у крвним судовима, где брзине могу бити велике па се инерцијалне силе не могу занемарити. Модел струјања флуида описан Навије – Стоксовом једначином је апроксимација која је ближа физичким условима струјања крви у крвним судовима, па је генерално заступљена у моделима.

У шестом поглављу су приказани неки од резултата струјања крви у микрофлуидним чиповима за сепарацију ћелија. Овакав нумерички модел може бити користан алат у пројектовању чипова за сепарацију ћелија. Варирањем геометрије чипа може се доћи до оптималног облика, што може бити значајна уштеда приликом пројектовања чипова, како у времену тако и у финансијским средствима. Такође, праћењем симулација струјања флуида у чиповима могу се донети извесни закључци око самог процеса везивања ћелија за зидове, који се не могу уочити у експерименталним истраживањима. Нумерички модел кретања ћелија у крви не може у потпуности да замени експериментална истраживања, али може бити добра основа за тумачење резултата експеримената.

Даљи правци развоја, у најкраћем осврту, биће усмерени на развој методологије која би била применљива на опште тродимензионалне случајеве кретања ћелија у крви. Црвена крвна зрнца састоје се од мембране биконкавног облика која је испуњена флуидом. Њихово деформисање приликом проласка кроз сужења у капиларима је веома сложено,

и дводимензионална апроксимација представља само једну од фаза у приближавању модела физичким условима струјања крви у капиларима. Тродимензионални модел би дао много јаснију слику деформисања црвених крвних зрнаца у капиларима.

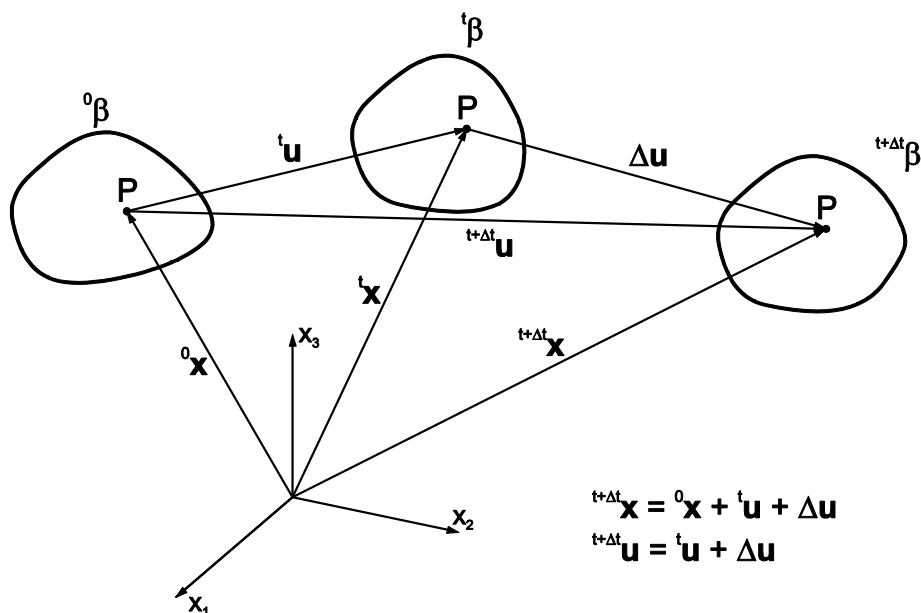
Још једна од могућих надоградњи постојећег програма је везивање ћелија за зидове крвних судова привлачним силама стохастичког карактера, које одговарају реалним условима хемодинамичке интеракције ћелија са зидовима крвних судова. Привлачним силама је могуће моделирати и агрегацију ћелија на зидовима крвних судова, која је од пресудног значаја у процесу стварања тромбозе.

Додатак А

Тотал Лагранж (Total Lagrangian) формулација за решавање геометријски нелинеарних проблема

Проблем кретања тела у простору подразумева велика померања. Осим тога, при кретању тела, тело може бити изложено оптерећењима под којима се јављају велике деформације. Код оваквих проблема зависност сила од померања је нелинеарна. Када се користи тотал Лагранж формулација, за опис кретања тела у случају великих померања, референтна конфигурација у односу на коју посматрамо положај тела, је почетна конфигурација.

Посматрамо проблем кретања материјалног тела, приказаног на слици А-1. Циљ је да се формира инкрементална једначина кретања и одреде конфигурације тела које одговарају задатим оптерећењима у временским тренуцима Δt , $2\Delta t$, $3\Delta t$, ... Претпоставка је да је позната конфигурација тела ${}^t\beta$, а циљ је да одредимо положај тела у конфигурацији ${}^{t+\Delta t}\beta$ (слика А-1).



Слика А-1: Кретање тела у односу на непокретни координатни систем

Принцип виртуалног рада, написан за конфигурацију ${}^{t+\Delta t}\beta$ је:

$${}^{t+\Delta t}\delta W_{int} = {}^{t+\Delta t}\delta W_{ext} \quad (A.1)$$

где су ${}^{t+\Delta t}\delta W_{int}$ и ${}^{t+\Delta t}\delta W_{ext}$ виртуални радови унутрашњих и спољашњих сила, респективно. Спољашње силе су познате и виртуални рад спољашњих сила може да се изрази преко варијације померања. Виртуални рад унутрашњих сила је [40]:

$${}^{t+\Delta t}\delta W_{int} = \int_{V_0} {}^{t+\Delta t}S_{ij} \delta {}^{t+\Delta t}\epsilon_{ij} dV_0 \quad (A.2)$$

где су:

${}^{t+\Delta t}S_{ij}$ – Пиола - Кирхофов напон друге врсте,

${}^{t+\Delta t}\epsilon_{ij}$ – Грин - Лагранжева деформација.

Пиола - Кирхофов напон и Грин - Лагранжева деформација у односу на референтну конфигурацију су, респективно:

$${}^{t+\Delta t}S = {}^{t+\Delta t}S_{ij} + {}_0S_{ij} \quad (A.3)$$

$${}^{t+\Delta t}\epsilon_{ij} = {}^t\epsilon_{ij} + \epsilon_{ij} \quad (A.4)$$

У једначини (A.4) инкремент ϵ_{ij} је, према [1]:

$${}_0\epsilon_{ij} = {}_0e_{ij} + {}_0\eta_{ij} \quad (A.5)$$

где су:

$${}_0e_{ij} = \frac{1}{2} \left({}_0u_{i,j} + {}_0u_{j,i} + {}^t u_{k,i} {}_0u_{k,j} + {}_0u_{k,i} {}^t u_{k,j} \right) \quad (A.6)$$

$${}_0\eta_{ij} = \frac{1}{2} {}_0u_{k,i} {}_0u_{k,j} \quad (A.7)$$

линеарни и нелинеарни инкремент Грин - Лагранжеве деформације, а u_i прираштаји померања.

Узимајући у обзир да је:

$$\delta {}^{t+\Delta t}{}_0\epsilon_{ij} = \delta {}_0\epsilon_{ij}, \quad \delta {}^{t+\Delta t}{}_0\eta_{ij} = \delta {}_0\eta_{ij} \quad (A.8)$$

и

$${}^0S_{ij} = {}^0C_{ijrs} {}^0\varepsilon_{rs} \quad (\text{A.9})$$

једначину кретања можемо написати у следећем облику:

$$\int_{V_0} {}^0C_{ijrs} {}^0\varepsilon_{rs} \delta_0 \varepsilon_{ij} dV_0 + \int_{V_0} {}^tS_{ij} \delta_0 \eta_{ij} dV_0 = {}^{t+\Delta t}W_{ext} - \int_{V_0} {}^tS_{ij} \delta_0 e_{ij} dV_0 \quad (\text{A.10})$$

Ако у првом интегралу уведемо апроксимацију за варијацију деформације:

$$\delta_0 \varepsilon_{ij} = \delta_0 e_{ij} \quad (\text{A.11})$$

добећемо коначан облик линеаризоване једначине кретања:

$$\int_{V_0} {}^0C_{ijrs} {}^0e_{rs} \delta_0 e_{ij} dV_0 + \int_{V_0} {}^tS_{ij} \delta_0 \eta_{ij} dV_0 = {}^{t+\Delta t}W_{ext} - \int_{V_0} {}^tS_{ij} \delta_0 e_{ij} dV_0 \quad (\text{A.12})$$

Једначина (A.12), преведена на дискретни облик методом коначних елемената, има облик:

$$\left({}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{K}_L^{(i-1)} + {}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{K}_{NL}^{(i-1)} \right) \Delta \mathbf{U}^{(i)} = {}^{t+\Delta t} \mathbf{F}_{ext} - {}^{t+\Delta t} \mathbf{F}_{int} \quad (\text{A.13})$$

где су:

$${}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{K}_L^{(i-1)} = \int_{V_0} {}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{B}_L^T \mathbf{C} {}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{B}_L dV_0 \quad (\text{A.14})$$

$${}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{K}_{NL}^{(i-1)} = \int_{V_0} {}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{B}_{NL}^T {}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{S}^{(i-1)} {}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{B}_{NL} dV_0 \quad (\text{A.15})$$

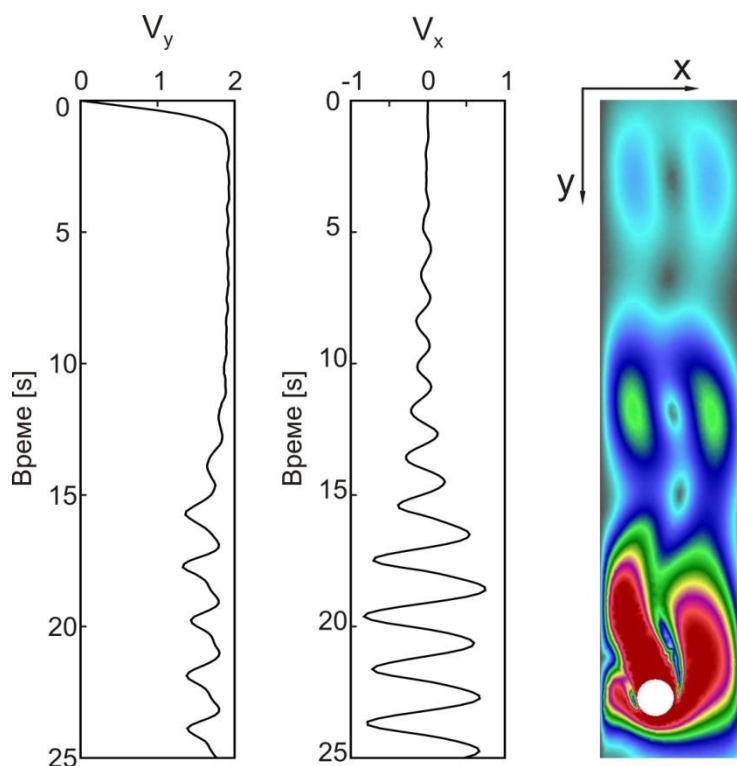
$${}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{F} = \int_{V_0} {}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{B}_L^T {}^{t+\Delta t}{}^0\mathbf{S}^{(i-1)} dV_0 \quad (\text{A.16})$$

Детаљи око рачунања појединих матрица и вектора у једначинама (A.14), (A.15) и (A.16) могу се пронаћи у литератури [2].

Додатак Б

Верификациони пример пропадања диска између две плоче [32]

У овом примеру посматра се тело облика диска (цилиндар јединичне висине), које пропада кроз флуид између две плоче под дејством гравитационе силе [32]. Тело се у почетном положају налази у стању мировања на средини канала. Подаци о моделу су: висина канала $H = 70\text{ cm}$, ширина канала $W = 2\text{ cm}$, пречник диска $d = 0.5\text{ cm}$, густина флуида $\rho_f = 1\text{ g/cm}^3$, динамичка вискозност $\mu = 0.001\text{ Pa s}$, густина солида $\rho_s = 1.01\rho_f$, Јангов модул $E = 1.0 \cdot 10^5\text{ MPa}$, Поасонов коефицијент $\nu = 0.499$.



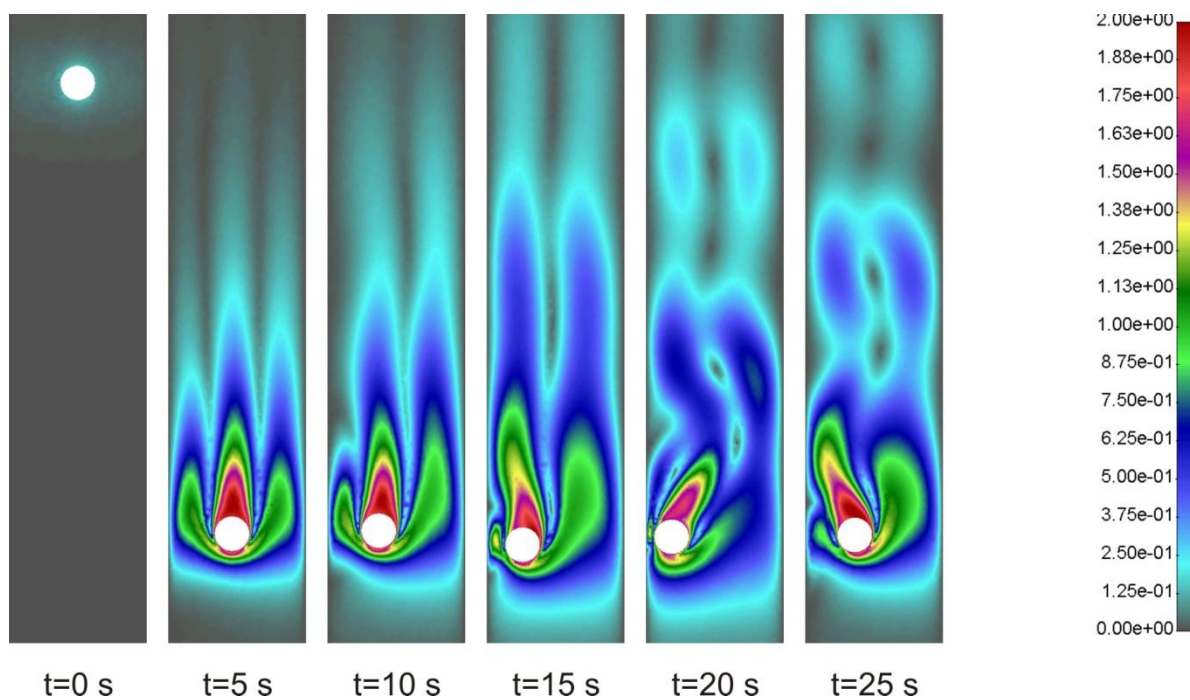
Слика Б-1: Пропадање диска кроз вертикални канал под дејством гравитационе силе

На слици Б-1 дати су резултати за брзину пропадања у вертикалном и хоризонталном правцу, добијени развијеном методологијом са ажурирањем мреже и софтвером PAKSF_remeshing. Са слике се може видети да вертикална компонента брзине расте до вредности блиске 2 cm/s , што је аналитичка вредност терминалне брзине. Разлика

густина солида и флуида је веома мала, па и је брзина пропадања релативно мала. Вредност Рејнолдсовог броја при оствареној максималној брзини је око 100.

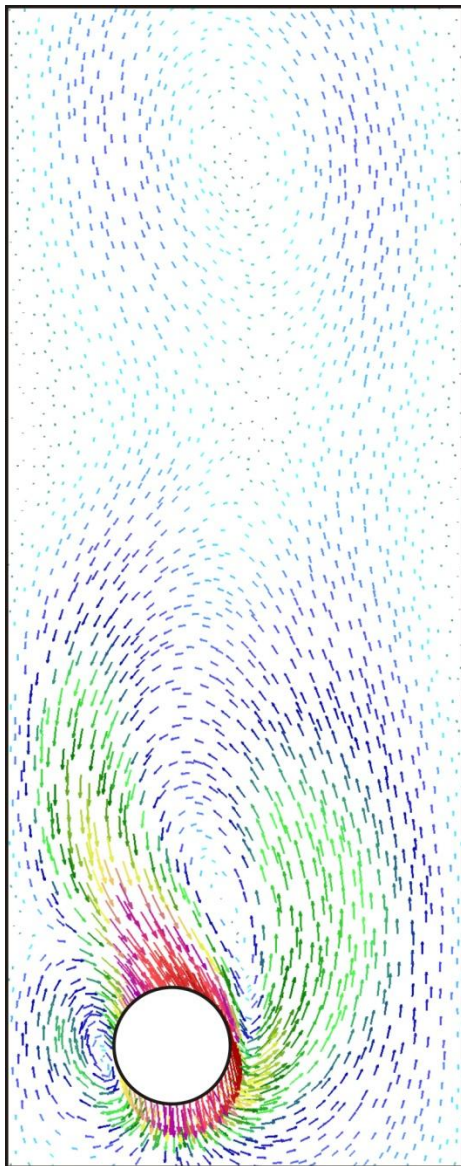
После извесног времена брзина пропадања добија осцилаторни карактер, што је последица појаве тзв. Карманових вртлога (Karman vortex street) у пољу флуида иза диска. Осцилаторни карактер се види на дијаграмима вертикалне и хоризонталне компоненте брзине. Добијени резултати су веома блиски резултатима добијеним методом директне нумеричке симулације, који су објављени у раду [32].

На слици Б-2 приказано је поље брзина за карактеристичне временске тренутке у току симулације пропадања диска између две плоче. Приказан је домен флуида у околини диска. Са слике се може видети да је почетни положај диска на средини канала, па је почетно поље брзина у флуиду симетрично. У тренутку $t = 5s$ поље брзина у флуиду је благо асиметрично. У тренутку $t = 10s$ асиметричност брзина је више изражена, а диск се више не налази на оси симетрије канала. У тренутку $t = 15s$ се могу приметити вртлози који се појављују у флуиду, а путања диска поприма осцилаторни карактер. У тренуцима $t = 20s$ и $t = 25s$ смерови брзина диска у попречном правцу су супротног знака.



Слика Б-2: Поље брзина у флуиду у околини диска који се креће у мирном флуиду под дејством гравитације

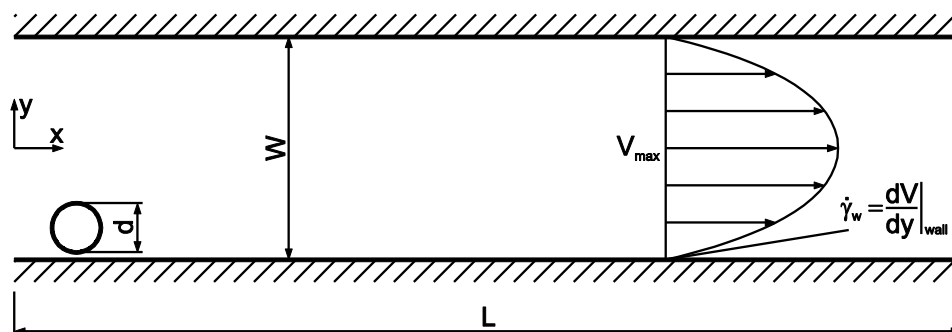
На слици Б-3 (на следећој страни) приказани су вектори брзина у домену флуида. Овде се јасно могу видети вртлози који се појављују иза тела (посматрано у односу на смер кретања тела).



Слика Б-3: Вектори брзина у флуиду при пропадању диска

Верификациони пример кретања тела под дејством сила флуида и гравитационих сила [56]

У овом примеру посматрамо кретање диска у флуиду између две плоче. На слици Б-4 приказана је геометрија модела.



Слика Б-4: Геометрија модела

Димензије модела су дате у функцији пречника диска: ширина канала $\frac{W}{d} = 12$, дужина

канала $\frac{L}{d} = 88$, пречник диска $d = 1\text{ cm}$. Материјални параметри за флуид и солид су:

густина флуида $\rho_f = 1.0 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$, динамичка вискозност флуида $\mu = 1\text{ poise}$, густина

солида $\rho_s = 1.01 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$, модул еластичности $E = 1.0 \cdot 10^5\text{ MPa}$, Поасонов коефицијент

$\nu = 0.49$.

Параметри на основу којих се израчунавају вредности брзина и спољашњих запреминских сила су смичући Рејнолдсов број и гравитациони Рејнолдсов број. Ова два параметра се израчунавају према следећим једначинама [56]:

$$R = \frac{\rho_f \dot{\gamma}_w d^2}{\eta} \quad (\text{Б.1})$$

$$G = \frac{(\rho_p - \rho_f) g d}{\eta \dot{\gamma}_w} \quad (\text{Б.2})$$

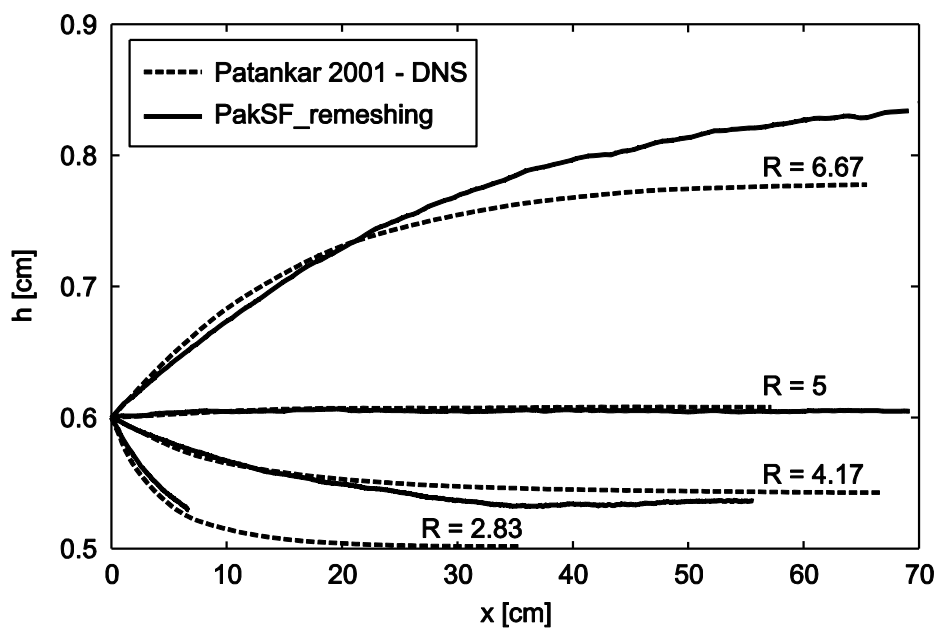
где су:

$$\dot{\gamma}_w = \left. \frac{dv}{dy} \right|_{wall} \quad - \text{смичући коефицијент (брзина смицања),}$$

$$\eta = \frac{\mu}{\rho_f} \quad - \text{кинематска вискозност,}$$

g – гравитационо убрзање.

На слици Б-5 је дат упоредни приказ резултата добијених методом директне нумеричке симулације, датих у раду [56] и резултата добијених методом коначних елемената, уз примену концепта ажурирања мреже флуида у току времена. Приказане су путање по којима се креће тежиште диска за четири вредности Рејнолдсовог броја: $Re = 6.67$, $Re = 5.0$, $Re = 4.17$ и $Re = 2.83$. Са слике се може видети да постоји релативно добро поклапање резултата. Постоји мало одступање за највећу вредност смичућег Рејнолдсовог броја, што је вероватно последица различитости примењених методологија.



Слика Б-5: Упоредни приказ резултата

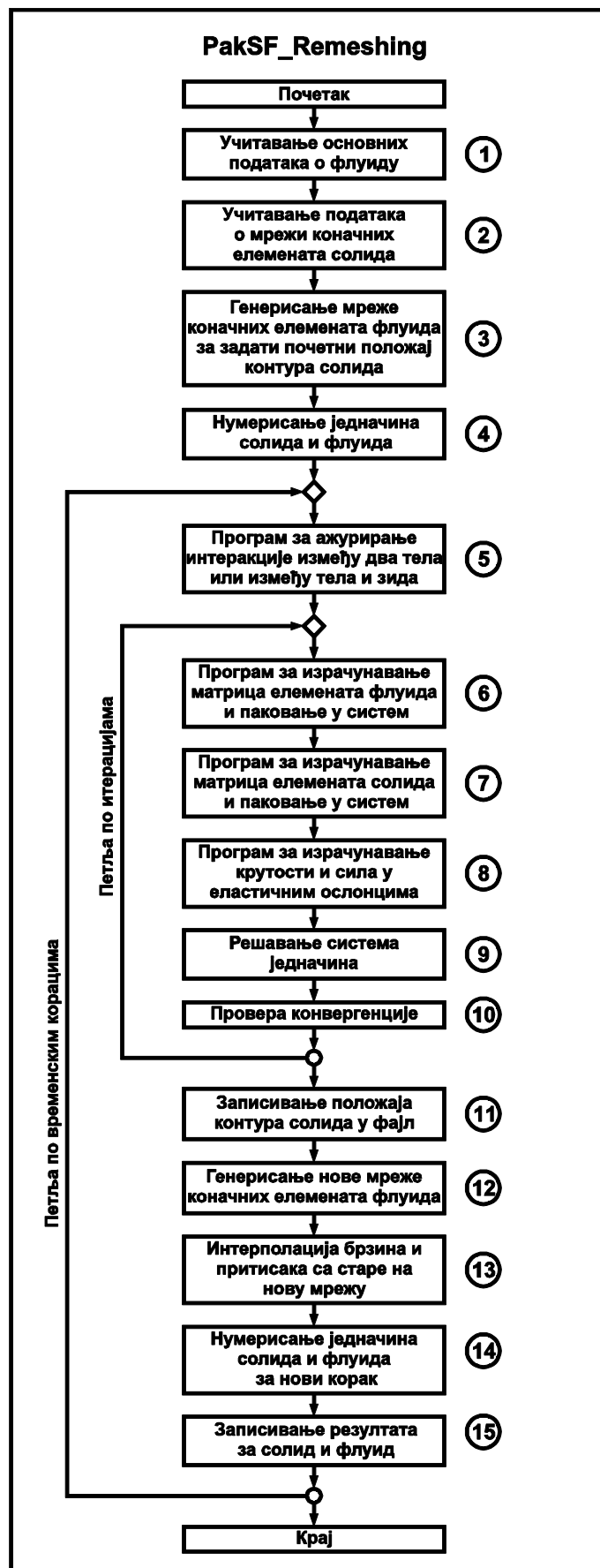
Додатак Ц

Шематски приказ рада програма за моделирање солид - флуид интеракције

Програм за решавање проблема солид - флуид интеракције методом јаког спрезања обједињује у себи више програмских целина. Састоји се од програма за дискретизацију једначине кретања солида, програма за дискретизацију једначина струјања флуида, програма за генерисање мреже коначних елемената флуида, програма за интерполацију брзина и притисака са једне мреже на другу, програма који обезбеђује интеракцију између два тела солида, или солида и границе флуидног домена (зида), итд. Свим овим програмима управља један програм који обезбеђује неопходну унутрашњу комуникацију. У наставку ће бити детаљно описан програмски ток. На слици Ц-1 дат је алгоритам програма.

Када се програм покрене, од корисника се тражи да унесе називе фајлова са подацима о солиду и флуиду (кораци 1 и 2 на слици Ц-1). У фајлу са подацима о флуиду налазе се општи подаци о флуиду: густина, динамичка вискозност, максималан број чворова и елемената, подаци о временским функцијама, итд. У фајлу са подацима о солиду налазе се сви подаци о солиду: густина, модул еластичности, Поасонов коефицијент, листа чворова, листа елемената, подаци о временским функцијама, подаци о задатим концентрисаним, површинским и запреминским силама, подаци о задатим брзинама или померањима, итд.

Поред ова два фајла, програм користи још три фајла за комуникацију између појединих модула. Када су учитани основни подаци о флуиду и геометрија и подаци о солиду, позива се екстерни програм Mesh_Generator, који се користи за генерисање мреже коначних елемената флуида. Програм из фајла "contour.txt" учитава спољашњу контуру флуида са задатим граничним условима, а из фајла "holes.txt" контурне тачке солида. Са овако задатим границама програм Mesh_Generator.exe генерише мрежу коначних елемената, коју затим записује у фајл "remesh.txt" (корак 3). У овом фајлу налазе се подаци о чворовима, ограничењима чворова, елементима, и задатим граничним условима. Када се заврши генерисање мреже флуида и записивање у фајл, главни програм PakSF_Remeshing учитава мрежу флуида и задате граничне услове.



Слика Ц-1: Алгоритам програма за солид - флуид интеракцију

Програм садржи податке о чворовима и елементима обе мреже. Сада се из главног програма позива подпрограма који нумерише једначине чворова флуида и солида, при чему се за чворове који су заједнички за солид и флуид поставља исти број једначине (корак 4). Програм затим улази у петљу по временским корацима. У сваком од временских корака се обављају програмски кораци од 5 до 15.

На почетку сваког временског корака испитују се међусобни положаји тела и положај тела у односу на контуру флуида. Уколико се неко тело нађе у зони интеракције неког другог тела или контуре флуида, појављују се линијски елементи (корак 5). Примена еластичних ослонаца је детаљно описана у четвртом поглављу.

Унутар петље по корацима налази се петља по итерацијама. У овој петљи се формира спрегнути систем једначина солида и флуида (кораци 6 и 7), додају крутости и силе линијских елемената, уколико постоје (корак 8), решава систем једначина са задатим граничним условима (корак 9) и проверава да ли је решење унутар унапред задате толеранције (корак 10). Петља по итерацијама се понавља све док норма прираштаја решења не задовољи услов конвергенције.

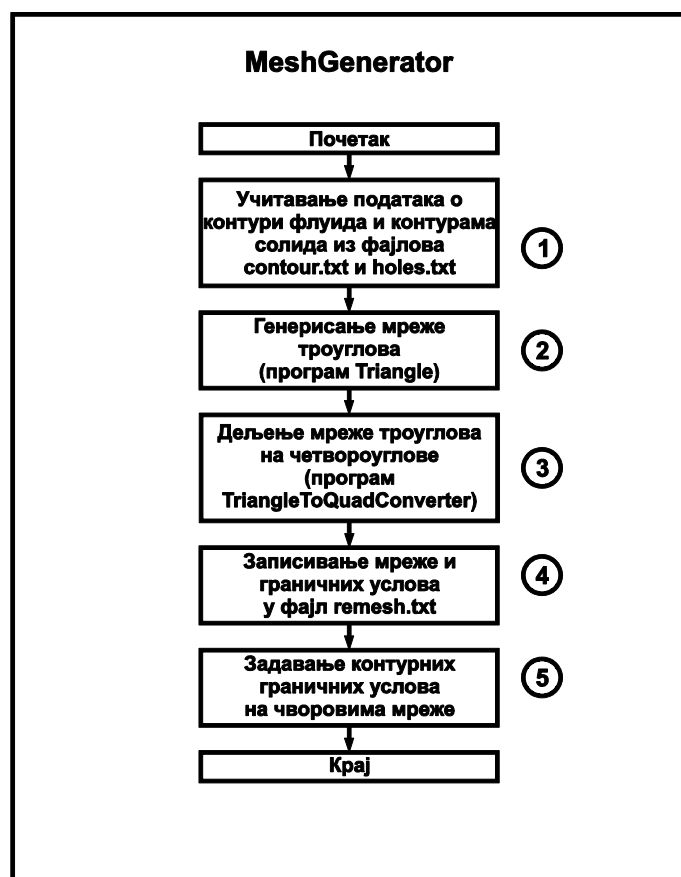
Када се оствари конвергенција, положај контура солида се записује у фајл "holes.txt". Коришћењем података о контурама солида из фајла који је претходно записан, и контуре флуида која се не мења у току прорачуна (налази се у фајлу "contour.txt"), поново се генерише мрежа флуида позивањем програма Mesh_Generator, и записује у фајл "remesh.txt" (корак 12). Затим се мрежа из фајла учитава у главни програм и интерполирају чворне вредности брзина и притисака са старе мреже, која је коришћена у текућем кораку, на нову мрежу која ће бити коришћена у наредном временском кораку (корак 13).

Пошто се у новом кораку користи нова мрежа, потребно је поново нумерисати једначине за солид и флуид (корак 14).

На крају петље по временским корацима, записују се резултати за солид и за флуид у посебне фајлове (paks_redni_broj_koraka.unv и pakf_redni_broj_koraka.unv).

Петља по временским корацима се понавља до задатог броја корака.

На слици Ц-2 дат је алгоритам програма Mesh_Generator. Програм учитава податке о положају контуре флуида са задатим контурним граничним условима, и положај контура солида (корак 1). За задате геометријске податке, програм генерише мрежу троуглова (корак 2), а затим, мрежу троуглова конвертује у мрежу четворочворних елемената (корак 3). Коришћењем граничних услова задатих на контури флуида, задају се одговарајући гранични услови на чворовима мреже коначних елемената (корак 4). Коначно, записује се листа чворова, елемената и граничних услова у фајл remesh.txt (корак 5).



Слика Ц-2: Алгоритам програма за генерисање неструктурних мрежа коначних елемената

Програм PakSF_Remeshing је базиран на постојећим програмима из програмског пакета PAK (Програм за анализу конструкција [42]). Постојећи програми развијани су у FORTRAN_77. Део кода који представља надоградњу постојећег, а односи се на решавање проблема солид - флуид интеракције писан је у FORTRAN_90, коришћењем техника модулрног програмирања.

Основа програма Mesh_Generator је програм Triangle [38], који се користи за генерисање неструктурних мрежа троуглова. У оквиру програма Mesh_Generator користи се програм TriangleToQuadConverter [52], чији је задатак да добијену мрежу троуглова конвертује у мрежу четвороуглова. Сви ови програми су писани у програмском језику C++, уз примену парадигми објектно – оријентисаног програмирања [15], [16].

8 Литература

- [1] Bathe K. J., Ledezma G. A. (2007) Benchmark problems for incompressible fluid flows with structural interactions, *Computers and Structures* 85 (2007) 628–644
- [2] Bathe K. J. (1996) *Finite Element Procedures*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J.
- [3] Becker E. B., Carey G.F., Oden J.T. (1981) *Finite Elements. An Introduction, Volume I*, Prentice Hall, Inc., New Jersey
- [4] Bradley C. J. (2007) *The Algebra of Geometry: Cartesian, Areal and Projective Coordinates*, Highperception
- [5] Chen X., Luo B., Yang R., Chen L. (2007) A Clinical Study on Coronary Artery Blood Velocity Measured by Digital Tracing Coronary Angiography, *Journal of Biomedical Engineering* 2007-02
- [6] Colomer J., Peters F., Marrase C. (2005) Experimental analysis of coagulation of particles under low-shear flow, *Water Research* 39 2994–3000.
- [7] Decuzzi P., Lee S., Bhushan B., Ferrari M. (2005) A theoretical model for the margination of particles within blood vessels, *Annals of Biomedical Engineering*. 33 (2), 179–190
- [8] Dettmer W.G., Peric D. (2007) A Fully Implicit Computational Strategy for Strongly Coupled Fluid–Solid Interaction, *Archives of Computational Methods in Engineering* 14: 205–247
- [9] Djukic, T. (2012) Modeliranje solid – fluid interakcije primenom LB metode, master rad, Fakultet inženjerskih nauka, Univerzitet u Kragujevcu
- [10] Eesa M., Barigou M. (2009) CFD investigation of the pipe transport of coarse solids in laminar power law fluids, *Chemical Engineering Science* 64 322 – 333
- [11] Feng Z.G., Michaelides E. E (2003) The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid–particles interaction problems, *International Journal of Multiphase Flow* 29, 943–957.
- [12] Ferrari M. (2005) Cancer nanotechnology: opportunities and challenges, *Nature reviews. Cancer*. 5(3):161-171.
- [13] Filipovic, N. (1999) Numeričko rešavanje spregnutih problema deformabilnog tela i fluida – doktorska disertacija, Mašinski fakultet u Kragujevcu.

-
- [14] Filipović, N. (2005) Modeliranje i simulacije kardiovaskularnih sistema, Centar za interdisciplinarne i multidisciplinarne studije i istraživanja, Univerzitet u Kragujevcu
- [15] Filipovic, N. (2001) Objektno – orjentisano programiranje, skripta, Tehnički fakultet Čačak
- [16] Filipovic, N. (2010) Algoritmi i strukture podataka, Mašinski fakultet, Univerzitet u Kragujevcu.
- [17] Filipovic, N. (2012) Osnovi bioinženjeringa, Fakultet inženjerskih nauka, Univerzitet u Kragujevcu
- [18] Filipovic, N., Cvetkovic, A., Isailovic, V., Matovic, Z., Rosic, M. and Kojic, M., Computer simulation of flow and mixing at the duodenal stump after gastric resection, *World Journal of Gastroenterology*, 15 (16), 1990-1998, 2009.
- [19] Filipovic N., Isailovic V., Djukic T., Ferrari M., Kojic M. (2012) Multiscale Modeling of Circular and Elliptical Particles in Laminar Shear Flow, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, vol. 59 br. 1, pp. 50-53
- [20] Fishman, G. S. (1995) Monte Carlo: Concepts, Algorithms, and Applications. New York, Springer.
- [21] Freeman B. (1985) The motion of rigid ellipsoidal particles in slow flows, *Tectonophysics* 113, 163-183
- [22] Gavze E., Shapiro M. (1996) Sedimentation of spheroidal particles in a vertical shear flow near a wall, *Journal of Aerosol Science* 27:585-586.
- [23] Gavze E., Shapiro M. (1997) Particles in a shear flow near a solid wall effect of nonsphericity on forces and velocities. *International Journal of Multiphase Flow* 23(1):155-182.
- [24] Gavze E., Shapiro M. (1998) Motion of inertial spheroidal particles in a shear flow near a solid wall with special application to aerosol transport in microgravity. *Journal of Fluid Mechanics* 371:59-79.
- [25] Gavze E., Shapiro M. (2000) Drift of heavy inertial ellipsoidal aerosol particles in a simple shear flow, *Journal of Aerosol Science* 31: 680-681
- [26] Glowinski R., Pan T. W., Hesla T. I., Joseph D. D., Periaux J., A Fictitious Domain Approach to the Direct Numerical Simulation of Incompressible Viscous Flow past Moving Rigid Bodies: Application to Particulate Flow (2001) *Journal of Computational Physics* 169, 363–426 (2001).
- [27] Goano C. D., Minev P. D., K. Nandakumar (2003) A fictitious domain/finite element method for particulate flows, *Journal of Computational Physics* 192, 105–123.

- [28] Gutfinger C., Fichman M., Pnueli D. (1998) Effect of particle loading on granular bed filtration—Extension of the CEF model to polydisperse systems, *Journal of Aerosol Science* 19, 443-450
- [29] Howard I. Scher, Xiaoyu Jia, Johann S. de Bono, Martin Fleisher, Kenneth J Pienta, Derek Raghavan, Glenn Heller (2009) Circulating tumour cells as prognostic markers in progressive, castration-resistant prostate cancer: a reanalysis of IMMC38 trial data, *The Lancet Oncology*, Volume 10, Issue 3
- [30] Hu H. H., Patankar N. A., Zhu M. Y. (2001) Direct numerical simulation of fluid-solid systems using the arbitrary Lagrangian-Eulerian technique, *Journal of Computational Physics* 169, 427–462.
- [31] Hu H. H., Joseph D. D., Crochet M. J. (1992) Direct simulation of fluid particle motions, *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 3, 285-306.
- [32] Hu H., Joseph D., (1992) Direct simulation of fluid particle motion, *Theoretical and Computational Fluid Dynamics Vol 3*, pp 285-306.
- [33] Hu H. (1995) Motion of a Circular Cylinder in a Viscous Liquid Between Parallel Plates, *Theoretical and Computational Fluid Dynamics Vol 7*, pp 441-455.
- [34] Isailovic V., Kojic M., Ferrari M., Zdravkovic N., Filipovic N. (2011) Drug delivery simulation - motion of circular and elliptical particles in laminar shear flow, 7th GRACM International Congress on Computational Mechanics, Athens, Greece
- [35] Isailovic V., Djukic T., Ferrari M., Filipovic N., Kojic M. (2011) Motion of circular and elliptical particles in laminar flows, Third Serbian (28th Yu) Congress on Theoretical and Applied Mechanics, Vlasina lake, Serbia
- [36] Ivanović, M. (2010) Glatka čestična hidrodinamika – paralelizacija algoritma i primena u dinamici fluida, doktorska teza, Prirodno – matematički fakultet, Univerzitet u Kragujevcu
- [37] Jayageeth C., Sharma V. I., Singh A. (2009) Dynamics of short fiber suspensions in bounded shear flow, *Int. J. Multiphase Flow* 35, 261-269
- [38] Jonathan Richard Shewchuk (2003) Triangle (Software), University of California at Berkeley
- [39] Kojic M., Filipovic N., Stojanovic B., Kojic N. (2008) Computer Modeling in Bioengineering - Theoretical Background, Examples and Software, John Wiley and Sons, Chichester, England
- [40] Kojic M., Bathe K. J. (2005) *Inelastic Analysis of Solids and Structures*. (Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin

- [41] Kojic M., Slavkovic R., Zivkovic M., Grujovic N. (1998) Metod konačnih elemenata I, Mašinski fakultet u Kragujevcu
- [42] Kojic M., Filipovic N., Slavkovic R., Zivkovic M., Grujovic N. (1998) PAK-FS - Finite Element Program for Fluid Flow and Fluid-Solid Interaction (University of Kragujevac and R&D Center for Bioengineering, Kragujevac, Serbia)
- [43] Kojic M. (1997) Computational Procedures in Inelastic Analysis of Solids and Structures, Center for Scientific Research of Serbian Academy of Science and Art and University of Kragujevac and Faculty of Mechanical Engineering University of Kragujevac
- [44] Kojic M., Filipovic N., Isailovic V., Vlastelica I., Stojanovic B., Petrovic D., Djukic T., Decuzzi P., Ferrari M. (2009) On loose vs strong coupling for fluid – solid interaction in case of deformable body motion through incompressible fluid. 2nd South - East European Conference on Computational Mechanics, Island of Rhodes
- [45] Kojic M., Ziemys A., Milosevic M., Isailovic V., Kojic N., Rosic M., Filipovic N., Ferrari M. (2011) Transport in biological tissues, JSSCM – Special Issue for Scientific Conference: Biomedical engineering for human health, Vol. 5 / No. 2, pp. 101-128
- [46] Kojic M., Filipovic N., Isailovic V., Vlastelica I., Stojanovic B., Petrovic D., Djukic T., Decuzzi P., Ferrari M. (2009) Application of loose and strong coupling for fluid – solid interaction in creeping flows. 2nd International Congress of Serbian Society of Mechanics (IConSSM 2009) Palić (Subotica)
- [47] Lam WA, Rosenbluth MJ, Fletcher DA (2007) Chemotherapy exposure increases leukemia cell stiffness, *Blood* 109(8):3505-8
- [48] Lee S. Y., Ferrari M., Decuzzi P. (2009) Shaping nano-/micro-particles for enhanced vascular interaction in laminar flows, *Journal of Biomechanics* 42, 1885–1890
- [49] Liu G. R. (2010) Meshfree Methods – Moving Beyond the Finite Element Method, Second edition, CRC Press
- [50] Matulka P., Du X., Walzel P. (2011) Particle motion and separation in a laminar tube flow with downstream enlargement, *Chemical Engineering Science* 66, 5930–5937.
- [51] Melandri C., Tarroni G., Prodi V., De Zaiacomo T., Formignani M., Lombardi C.C. (1983) Deposition of charged particles in the human airways, *Journal of Aerosol Science*, Volume 14, Issue 5, 657–669
- [52] Milašinović D. (2008) TriangleToQuadConverter (Software), R&D Center for Bioengineering, Kragujevac, Serbia

- [53] Nesbitt W. S., Westein E., Tovar-Lopez Ф. J., Tolouei E., Mitchell A., Fu, J, Carberry J., Fouras A., Jackson S. P. (2009) A shear gradient–dependent platelet aggregation mechanism drives thrombus formation, *Nature Medicine* 15, 665 – 673
- [54] Ng B. H., Kwan C. C., Ding Y. L., Ghadiri M. and Fan X. F. (2007) Solids Motion of Calcium Carbonate Particles in a High Shear Mixer Granulator: A Comparison between Dry and Wet Conditions, *Powder Technology* 177, 1-11
- [55] Nott P. R., Brady J. F. (1994) Pressure – driven flow of suspensions: simulation and theory, *Journal of Fluid Mechanics* 275, 157-199.
- [56] Patankar, N. A., Huang P. Y., Ko T., Joseph D. D. (2001) Lift-off of a single particle in Newtonian and viscoelastic fluids by direct numerical simulation, *Journal of Fluid Mechanics* 438, 67-100.
- [57] Pozrikidis C. (2006) Interception of two spheroidal particles in shear flow *Journal of Non-Newtonian Fluid Mech.* 136, 50–63.
- [58] Pozrikidis C. (2006) Flipping of an adherent blood platelet over a substrate *Journal of Fluid Mechanics* 568, 161–172.
- [59] Prosperetti A., Oguz H. N. (2001) Physalis: A New $o(N)$ Method for the Numerical Simulation of Disperse Systems: Potential Flow of Spheres, *Journal of Computational Physics* 167, 196–216
- [60] Qian S., Ai Y. (2012)., *Electrokinetic Particle Transport in Micro-Nanofluidics*. CRC Press
- [61] Rabindm D. Mehta, Jani Macari Pallis (2001) *Sports Ball Aerodynamics: Effects of Velocity, Spin and Surface Roughness*, Materials and Science in Sports, 184 Thorn Hill Road Warrendale
- [62] Rankovic, V. (2007) Korelacija karakteristika metalne arterijske endoproteze i biomehaničkih karakteristika površinske butne arterije u aduktornom kanalu, *Doktorska disertacija*, Centar za interdisciplinarne i multidisciplinarne studije i istraživanja, Univerzitet u Kragujevcu
- [63] Rapaport D.C. (2004) *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press
- [64] Singh A., Nott P. R. (2000) Normal stresses and Microstructure in bounded sheared suspensions via Stokesian dynamics simulations, *Journal of Fluid Mechanics* 412, 279-301
- [65] Singh P., Hesla T. I., Joseph D. D. (2003) Distributed Lagrange multiplier method for particulate flows with collisions *International Journal of Multiphase Flow* 29, 495–509.

- [66] Stojanovic, B. (2007) Generalizacija fenomenološkog Hilovog modela u cilju izučavanja zamora mišića, Doktorska disertacija, Centar za interdisciplinarne i multidisciplinarne studije i istraživanja, Univerzitet u Kragujevcu
- [67] Subra Suresh (2007) Nanomedicine: Elastic clues in cancer detection, *Nature Nanotechnology* 2, 748 – 749
- [68] Sunitha Nagrath, Lecia V. Sequist, Shyamala Maheswaran, Daphne W. Bell, Daniel Irimia, Lindsey Ulkus, Matthew R. Smith, Eunice L. Kwak, Subba Digumarthy, Alona Muzikansky, Paula Ryan, Ulysses J. Balis, Ronald G. Tompkins, Daniel A. Haber, Mehmet Toner (2007) Isolation of rare circulating tumour cells in cancer patients by microchip technology, *Nature Letters*, Vol 450 20/27
- [69] Vlastelica I., Isailovic V., Djukic T., Filipovic N., Kojic M.. (2008) On Accuracy of the Element - Free Galerkin (EFG) Method in Modeling Incompressible Fluid Flow. *Journal of the Serbian Society for Computational Mechanics*; Vol.2 No. 1, 90-99
- [70] Veljković D. (2012) Simulacija pasivnog biomehaničkog odziva arterijskog zida primenom hiperelastičnih materijalnih modela, doktorska disertacija, Fakultet inženjerskih nauka, Univerzitet u Kragujevcu.
- [71] Wang X., Liu W.K. (2004) Extended immersed boundary method using FEM and RKPM, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 193, 1305-1321.
- [72] Witten I. H., Frank E., Hall M. A. (2011). *Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques*, Elsevier.
- [73] Wriggers P. (1995) Finite element algorithms for contact problems, *Archives of Computational Methods in Engineering*, Volume 2, Number 4, 1-49
- [74] You C. F., Li G. H., Qi H. Y., Xu X. C. (2004) Motion of micro-particles in channel flow, *Atmospheric Environment* 38, 1559–1565.
- [75] Zhang L., Gerstenberger A., Wang X., Liu W.K. (2004) Immersed finite element method, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 193, 2051-2067.
- [76] Zivkovic M. (2006) Nelinearna analiza konstrukcija, Mašinski fakultet u Kragujevcu, Srbija