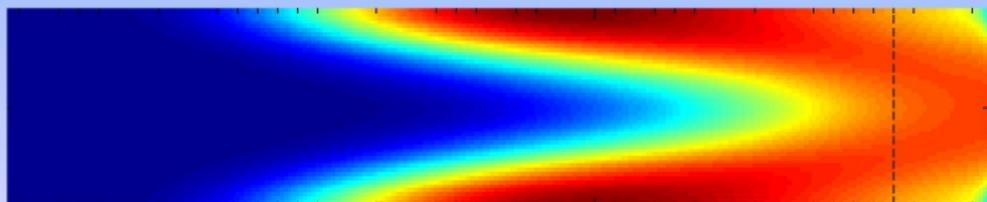


A21 - Biofluidodinamica

Dosaggio ottimo e mixing in un micro-canale



Introduzione

- ▶ Microfluidodinamica sta emergendo come un nuovo settore con potenziali impatti in ambiti scientifici e tecnologici
- ▶ Caratteristiche: piccole portate e moto laminare
- ▶ Problema: le instabilità idrodinamiche sono inibite dalla bassa inerzia del flusso
- ▶ Strategie per incrementare il mixing sono necessarie

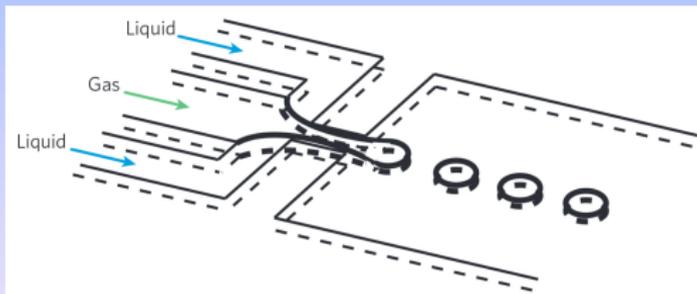


Figura: Esempio di dispositivo microfluidico, da Whitesides (2006).

Stato dell'arte

- ▶ Sistemi attivi: campi di pressione, elettrici, sonori
- ▶ Sistemi passivi: diffusione molecolare o caotica

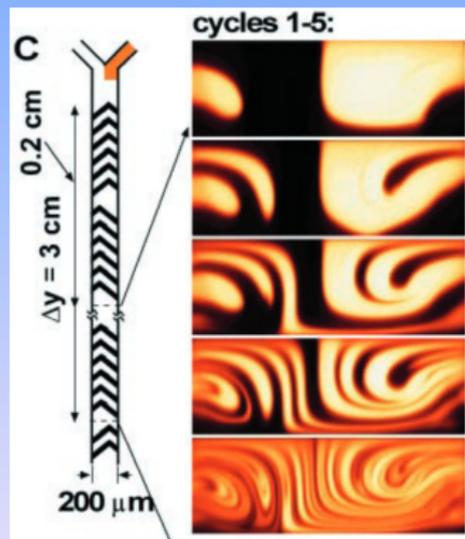


Figura: Esempio di diffusione caotica in canale con rilievi a spina di pesce, da *AD Stroock (2002)* .

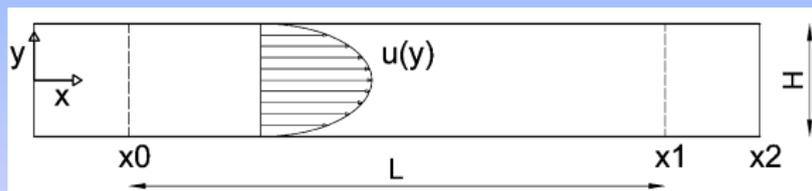
Una nuova strategia

- ▶ **Idea:** come poter incrementare il mixing utilizzando le tecniche di ottimizzazione?
- ▶ Controllando una serie di iniettori
- ▶ Integrazione ottima tra:
 - ▶ avvezione
 - ▶ iniezione
 - ▶ diffusione molecolare
- ▶ Si adatta a sistemi discontinui e permette di regolare il dosaggio

Formulazione del problema (1)

- ▶ Profilo di velocità parabolico $u(y) = 1 - 4y^2$
- ▶ Equazione di avvezione-diffusione in 2-D

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - S = 0, \quad (1)$$



- ▶ Condizioni al contorno
 - ▶ $C(0, y, t) = 0$
 - ▶ $C(x_2, y, t) = 0$
 - ▶ $\partial C(x, y, t) / \partial y|_{y=\pm 0.5} = 0$
 - ▶ $C(x, y, 0) = 0$ (condizione iniziale)

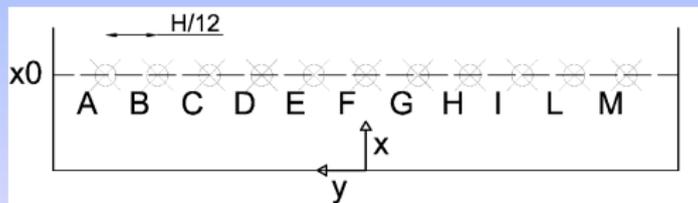
Formulazione del problema (2)

- Le sorgenti sono rappresentate da

$$S(x, y, t) = s_i(t)\delta(x - x_0)\delta(y - y_i) \quad (2)$$

$$i = A \dots M (\text{sorgenti})$$

Nota: S deve essere piccolo abbastanza da non alterare il profilo di velocità



Obiettivo: calcolare il dosaggio ottimo $s_i(t)$ in un dato intervallo di tempo $0 \leq t \leq T$ che produca la concentrazione richiesta C_t in una certa sezione x_1 al tempo finale T .

Dosaggio ottimo (1)

La **funzione obiettivo** è definita come

$$J = \int_0^L \int_{-0.5}^{0.5} h[C(x, y, T) - C_t]^2 dy dx \quad (3)$$

Il problema vincolato puo essere riscritto come non vincolato

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & J - \int_0^T \langle a, F(C, S) \rangle dt - \langle b_1(x, y), C(x, y, 0) \rangle \\ & - \int_0^T \int_{-0.5}^{0.5} [b_2(y, t)C(0, y, t) + b_3(y, t)C(L, y, t)] dy dt \\ & - \int_0^T \int_0^L \left[b_4 \frac{\partial C(x, -0.5, t)}{\partial y} + b_5 \frac{\partial C(x, 0.5, t)}{\partial y} \right] dx dt, \end{aligned} \quad (4)$$

Dosaggio ottimo (2)

Il gradiente di \mathcal{L} rispetto a C fornisce l'equazione aggiunta

$$-\frac{\partial a}{\partial t} - u \frac{\partial a}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} \right) = 0, \quad (5)$$

con le condizioni al contorno

- ▶ $a(0, y, t) = 0$,
- ▶ $a(L, y, t) = 0$,
- ▶ $\partial a(x, y) / \partial y|_{y=\pm 0.5} = 0$,

e condizione iniziale

- ▶ $a(x, y, T) = 2h[C(x, y, T) - C_t]$.

Il gradiente di \mathcal{L} rispetto a s fornisce la condizione di ottimalità

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s_i} = -a(x_0, y_i, t) \quad (6)$$

Dosaggio ottimo (3)

Il problema è risolto iterativamente cercando il minimo del gradiente $\nabla_{s_i} \mathcal{L} < \epsilon$ e della funzione obiettivo J

DO

1. Solve Eq. (1) from $t = 0$ to $t = T$
2. Solve Eq. (5) from $t = T$ to $t = 0$
3. Check $dJ = (J^{k+1} - J^k)/J^k$ and $\nabla_{s_i} \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s_i}$
4. $k = k + 1$, $s_i^{k+1}(t) = s_i^k(t) - \rho \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s_i} \right)^k$

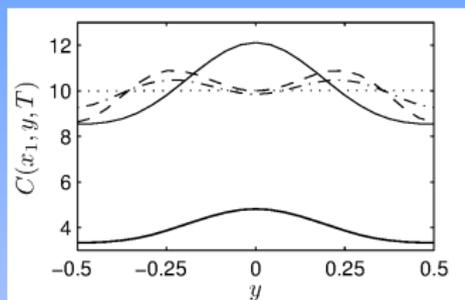
WHILE $dJ < \epsilon$ and $\nabla_{s_i} \mathcal{L} < \epsilon$

Risoluzione numerica FTCS (Forward Time, Central Space)

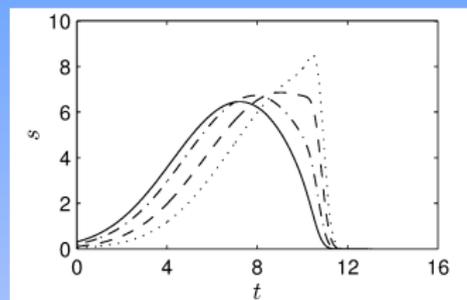
Risultati (1)

video prime iterazioni DIRETTO-AGGIUNTO

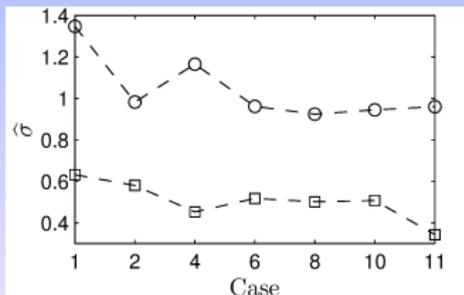
Risultati (2)



(a) Profili di concentrazione:
 $Pe = 150$

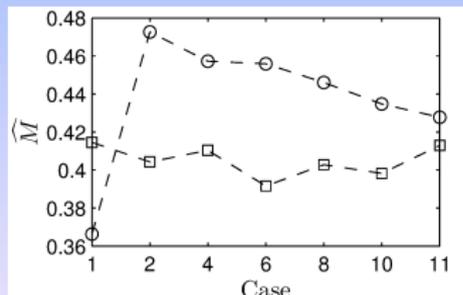


(b) Curve di iniezione:
8 sorgenti



(c) Grado di mixing

○ $Pe = 100$,



(d) Massa utilizzata

□ $Pe = 150$

Conclusioni

Risultati:

- ▶ Omogeneizzazione profilo concentrazione
- ▶ Configurazione multi-sorgente efficace
- ▶ Strategia di immissione
- ▶ Riduzione sostanza emessa

Prospettive future:

- ▶ Validazione sperimentale
- ▶ Problematiche costruttive
- ▶ Applicazione ad ambito specifico (es. biomedico)

Mussetti G., Pralits J. O., Mazzino A. (2014) Achieving uniform concentration by optimised dosage in a microchannel. *Meccanica* 49:2543-2547

Bibliografia

-  Whitesides G. M. (2006) The origin and the future of microfluidics. *Nature* 44:368-373
-  Stroock A. D. et al. (2002) Chaotic Mixer for Microchannels. *Science* 295:647-651
-  Mazzino A. et al. (2005) Multiple-scale analysis and renormalization for preasymptotic scalar transport. *Phys Rev E* 71:011113
-  Mussetti G., Pralits J. O., Mazzino A. (2014) Achieving uniform concentration by optimised dosage in a microchannel. *Meccanica* 49:2543-2547

Grazie per l'attenzione