

**ΑΝΑΜΙΞΗ ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΠΕΔΙΩΝ ΣΕ ΜΙΚΡΟΑΓΩΓΟΥΣ****Ε. Καρβέλας<sup>1</sup>, Χ. Λιόσης<sup>1</sup>, Θ. Καρακασίδης<sup>1,\*</sup>, Ι. Σαρρής<sup>2</sup>**<sup>1</sup>Εργαστήριο Υδρομηχανικής και Περιβαλλοντικής Τεχνικής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πολυτεχνική Σχολή, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Βόλος, Ελλάδα<sup>2</sup> Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Δυτικής Αττικής, Αθήνα, Ελλάδα(\**thkarak@civ.uth.gr*)**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Η αύξηση της ρύπανσης των υπόγειων και επιφανειακών υδάτων από βαρέα μέταλλα και βιολογικούς παράγοντες δημιουργεί σοβαρά προβλήματα στην ποιότητα των υδάτινων πόρων, μειώνοντας ουσιαστικά την παροχή πόσιμου νερού για ανθρώπινη χρήση. Σε αυτή την εργασία διερευνάται ο καθαρισμός του νερού από βαρέα μέταλλα με την χρήση μαγνητικών νανοσωματιδίων σε μικροροϊκά συστήματα. Στην τεχνική αυτή, ο πιο σημαντικός παράγοντας είναι ο αναμίκτης ενώ η αποτελεσματική ανάμιξη και η οδήγηση σωματιδίων επιτυγχάνονται με εξωτερικά μαγνητικά πεδία.

Σε αυτή την εργασία προτείνεται μια μέθοδος η οποία βασίζεται στην εφαρμογή μόνιμων και βαθμιδωτών μαγνητικών πεδίων σε διαλύματα με μαγνητικά σωματίδια για ομοιόμορφη ανάμιξη ακόμα και σε ακανόνιστες κοιλότητες. Σε σύγκριση με τις παραδοσιακές τεχνικές, η μέθοδος αυτή αναμένεται να επιτύχει αύξηση της ταχύτητας των χημικών διεργασιών και να μειώσει τους χρόνους καθαρισμού του νερού από τα βαρέα μέταλλα. Για την μελέτη της μεθόδου υλοποιήθηκαν προσομοιώσεις της ροής του νερού και των νανοσωματιδίων, με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής. Οι εξισώσεις (3D) Navier-Stokes επιλύονται για το πεδίο ροής, ενώ οι τροχιές των μαγνητικών νανοσωματιδίων υπολογίζονται με τη χρήση της μεθόδου Lagrange. Για την αξιολόγηση των δυνατοτήτων αυτής της μεθόδου, εκτελούνται σειρές προσομοιώσεων όπου εξετάστηκε η επίδραση της κλίσης του μαγνητικού πεδίου ( $\nabla B$ ) στην κίνηση των νανοσωματιδίων. Επιπρόσθετα, μελετώνται η παροχή μάζας καθώς επίσης και το σημείο εισόδου των νανοσωματιδίων στον αναμίκτη με σκοπό την ανάλυση και αξιολόγηση των αποτελεσμάτων για βέλτιστη ανάμιξη των νανοσωματιδίων με το ακάθαρτο νερό.

**ΕΙΣΑΓΩΓΗ**

Το πρόβλημα της ποιότητας του νερού είναι ένα επίμονο παγκόσμιο ζήτημα, δεδομένου ότι η αύξηση του πληθυσμού, η αστικοποίηση και η εκβιομηχάνιση, μολύνουν συνεχώς τους υδρολογικούς πόρους<sup>[1]</sup>. Τα βαρέα μέταλλα απελευθερώνονται στο περιβάλλον από τα εργοστάσια επιμετάλλωσης, τα μεταλλεία και την κατασκευή κραμάτων αποτελώντας σημαντική απειλή για το περιβάλλον και τη δημόσια υγεία. Τα βαρέα μέταλλα έχουν τη δυνατότητα να συσσωρεύονται στο περιβάλλον, αλλά το κυριότερο πρόβλημα είναι ότι δεν μπορούν να μεταβολιστούν ή να αποσυντεθούν.

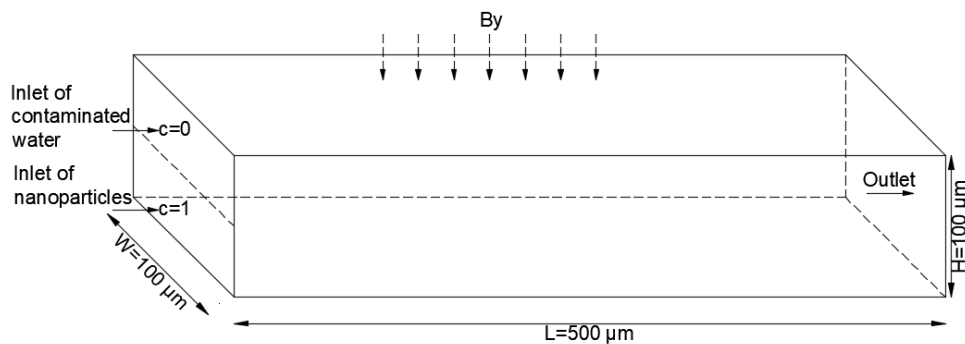
Η έκθεση σε βαρέα μέταλλα προκαλεί τοξικότητα στον άνθρωπο με αποτέλεσμα να επηρεάζει την υγεία του. Οι επιπτώσεις των βαρέων μετάλλων στην υγεία μπορεί να είναι απώλεια μνήμης, αλλεργικές αντιδράσεις, υψηλή πίεση, κατάθλιψη, ευερεθιστότητα, επιθετική συμπεριφορά, αϋπνία, δυσλεξία, αυξημένη χοληστερόλη, τριγλυκερίδια, νευροπάθεια και αυτοάνοσες ασθένειες<sup>[2]</sup>. Συνεπώς, απαιτούνται αξιόπιστες μέθοδοι για την απομάκρυνση των βαρέων μετάλλων από το πόσιμο νερό<sup>[3-6]</sup>. Επιπλέον, οι τρέχουσες τεχνολογίες επεξεργασίας των υδάτων και των λυμάτων που χρησιμοποιούνται φθάνουν στο όριο τους για την παροχή επαρκούς ποιότητας νερού με σκοπό την κάλυψη των ανθρώπινων αναγκών<sup>[7]</sup>.

Οι πρόοδοι στη νανοτεχνολογία προσφέρουν μεγάλες ευκαιρίες για την επεξεργασία και τον καθαρισμό του νερού<sup>[8]</sup>. Ο συνδυασμός της νανοτεχνολογίας και των μικροαναμικτών μπορεί να προσφέρει αποτελεσματικά, καθαρό νερό. Επιπλέον, αυτός ο συνδυασμός μπορεί να προσφέρει

νέες δυνατότητες καθαρισμού του νερού που θα μπορούσαν να επιτρέψουν οικονομική χρήση των αντισυμβατικών πηγών ύδατος με αποτέλεσμα την επέκταση της υδροδότησης<sup>[9]</sup>. Σε αυτή τη εργασία, ένα ρεύμα μολυσμένου νερού από βαρέα μέταλλα και ένα ρεύμα διαλύματος σωματιδίων εισάγεται σε έναν μικροαναμίκτη. Η ανάμιξη των σωματιδίων με το ακάθαρτο νερό γίνεται κάτω από διαφορετικές τιμές κλίσεων του μαγνητικού πεδίου, ενώ οι εντάσεις και συχνότητες του μαγνητικού πεδίου παραμένουν σταθερές. Στόχος της εργασίας είναι τα νανοσωματίδια να διασκορπιστούν ομοιόμορφα στον αγωγό έτσι ώστε με τις κατάλληλες χημικές αντιδράσεις, τα βαρέα μέταλλα να προσκολληθούν στα νανοσωματίδια, καθαρίζοντας με αυτόν τον τρόπο το νερό.

## ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

Η ροή νερού στο 3D αγωγό της συσκευής μικροανάμιξης αναμένεται να είναι στρωτή και σταθερή. Η γεωμετρία της συσκευής μικροανάμιξης παρουσιάζεται στο σχήμα 1. Το μήκος του της συσκευής είναι  $L = 5 \times 10^{-4}$  m ενώ το ύψος και το πλάτος είναι ίσο με  $W = H = 1 \times 10^{-4}$  m. Τα δύο ρεύματα, το μολυσμένο νερό και το σωματιδιακό, εισέρχονται στο μικροαναμίκτη από δύο διαφορετικές εισόδους οι οποίες βρίσκονται στην ίδια πλευρά του μικροαγωγού.



**Σχήμα 1.** Αναπαριστά την γεωμετρία των προσομοιώσεων όπου το μολυσμένο νερό και το σωματιδιακό, εισέρχονται στο μικροαναμίκτη από δύο διαφορετικές εισόδους ενώ εξέρχονται από κοινή έξοδο.

Για την εύρεση του πεδίου ταχύτητας του ρευστού χρησιμοποιούνται οι μη συμπιεσμένες εξισώσεις Navier-Stokes οι οποίες επιλύονται με την μέθοδο Euler, για την πίεση  $p$  και την ταχύτητα  $u$ . Η κίνηση των σωματιδίων επιλύεται με τη χρήση της μεθόδου Lagrange για την διακριτή φάση. Οι εξισώσεις για την συνεχή φάση του ρευστού δίδονται από [10]:

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u = -\nabla p + \nu \nabla^2 u \quad (2)$$

όπου,  $t$  είναι ο χρόνος και  $\nu$  το κινηματικό ιξώδες του νερού. Οι εξισώσεις για την κίνηση των σωματιδίων για τη διακριτή φάση βασίζονται στον νόμο Newton και δίνονται από:

$$m_i \frac{\partial u_i}{\partial t} = F_{mag,i} + F_{nc,i} + F_{tc,i} + F_{drag,i} + F_{grav,i} \quad (3)$$

$$I_i \frac{\partial \omega_i}{\partial t} = M_{drag,i} + M_{con,i} + T_{mag,i} \quad (4)$$

όπου, ο δείκτης  $i$  αντιπροσωπεύει το  $i$ -σωματίδιο με διάμετρο  $d_i$ ,  $u_i$  και  $\omega_i$  είναι οι γραμμικές και γωνιακές ταχύτητες, αντίστοιχα, και  $m$  είναι η μάζα του. Η ροπή αδράνειας είναι  $I_i$  και οι όροι  $\frac{\partial u_i}{\partial t}$

και  $\frac{\partial \omega_i}{\partial t}$  αντιστοιχούν στις γραμμικές και γωνιακές επιταχύνσεις, αντίστοιχα.  $F_{mag,i}$  είναι η μαγνητική δύναμη  $F_{nc,i}$  και  $F_{tc,i}$  είναι οι γραμμικές και εφαπτομενικές δυνάμεις επαφής, αντίστοιχα.  $F_{drag,i}$  είναι η υδροδυναμική δύναμη,  $F_{grav,i}$  είναι η συνολική δύναμη που οφείλεται στην άνωση.  $M_{drag,i}$  και  $M_{con,i}$  είναι οι ροπές οπισθέλκουσας και επαφής, αντίστοιχα.  $T_{mag,i}$  είναι η ροπή εξαίτιας του μαγνητικού πεδίου.

Για τον υπολογισμό του πεδίου ροής και της κίνησης των σωματιδίων χρησιμοποιείται η πλατφόρμα OpenFoam. Αρχικά, η εύρεση του πεδίου ροής (πίεση και ταχύτητα) εξακριβώνεται χρησιμοποιώντας τις ασυμπίεστες εξισώσεις Navier-Stokes και τη μέθοδο PISO. Η κίνηση των σωματιδίων εξακριβώνεται με την Lagrangian. Το υπολογιστικό το πλέγμα για τον αγωγό μικροαναμίκτη που μελετάται εδώ, αποτελείται από 81,250 (hexaedra) υπολογιστικά κελιά που είναι επαρκής αριθμός για τον χαμηλό αριθμό Reynolds της τρέχουσας ροής της οποίας η μέγιστη τιμή είναι  $Re = \frac{U_0 * H}{\nu} \approx 2 \times 10^{-2}$ , με βάση το ύψος του αγωγού και τη μέση ταχύτητα  $U_0$ . Επιπλέον στον αγωγό επιδρά σταθερής έντασης εξωτερικό μαγνητικό πεδίο By κατά τον άξονα y, αλλά χρονικά μεταβαλλόμενο με συχνότητα 5Hz. Λεπτομέρειες για τα αριθμητικά μοντέλα, τις δυνάμεις και τις ροπές που χρησιμοποιούνται στις εξισώσεις δίνονται στις αναφορές [10,11]. Στον παρακάτω Πίνακα 1 παρουσιάζονται αναλυτικά οι παράμετροι των προσομοιώσεων.

**Πίνακας 1.** Παράμετροι Προσομοιώσεων.

Παράμετροι Προσομοιώσεων		
Διαστάσεις της γεωμετρίας	Μήκος (L): $5 \times 10^{-4}$ m Ύψος(H): $1 \times 10^{-4}$ m, Πλάτος (W): $1 \times 10^{-4}$ m	
Διάμετρος Σωματιδίων	1 $\mu$ m	
Σωματίδια ανά δευτερόλεπτο	3000	
Πυκνότητα Σωματιδίων	1087 kg/m <sup>3</sup>	
Ένταση Μαγνητικού Πεδίου B=0.6T	Συχνότητα f=5 Hz	Κλίση Μαγνητικού Πεδίου (5-10) T/m
	Οριακές Συνθήκες	
	Ταχύτητα (U) (m/s)	Πίεση (p) (pa)
Μολυσμένο Νερό (Vc)	0.0005	μηδενική κλίση
Σωματίδια (Vp)	0.0005	μηδενική κλίση
Έξοδος	μηδενική κλίση	0
Τοιχώματα	0	μηδενική κλίση

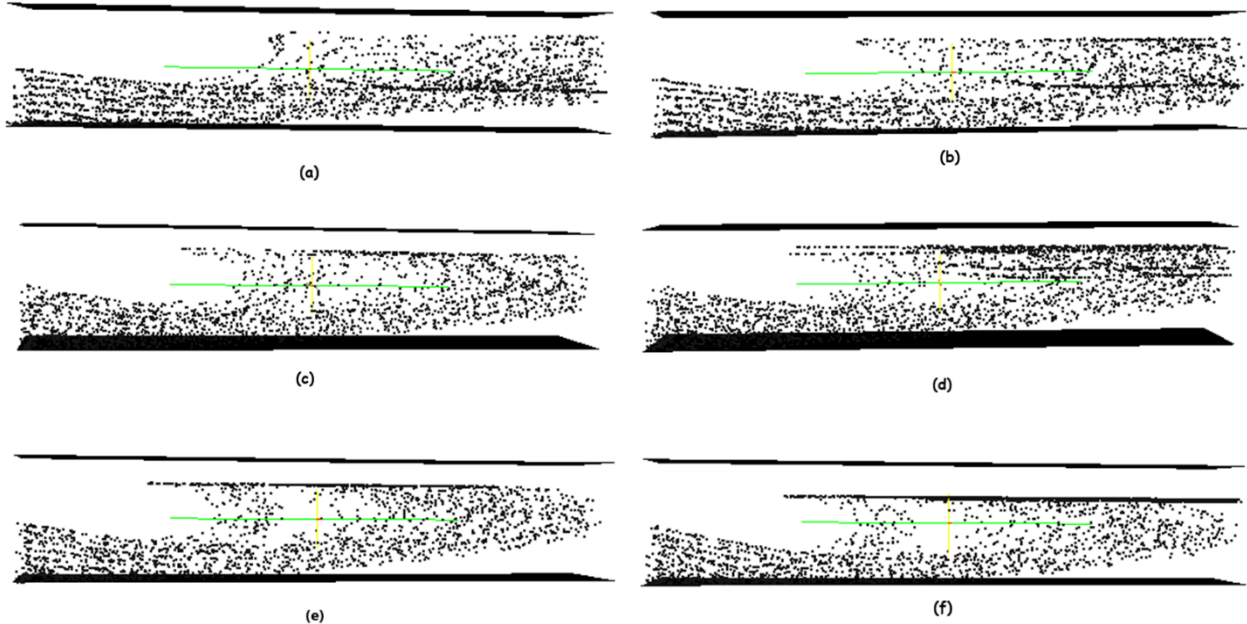
## ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Στην εικόνα 1 παρουσιάζονται οι θέσεις των νανοσωματιδίων μέσα στον αγωγό κατά την φάση της ανάμειξης των ρευστών συναρτήσει της κλίσης του μαγνητικού πεδίου. Στις εικόνες (α),(b) τα νανοσωματίδια έχουν κατανεμηθεί αρκετά καλά σχεδόν σε όλο το ύψος του αγωγού. Επιπλέον παρατηρούμε ότι η ανάμειξη έχει ξεκινήσει από το μέσον του αγωγού και μετά.

Στις εικόνες (c), (d) τα νανοσωματίδια έχουν κατανεμηθεί αρκετά καλά σχεδόν σε όλο το ύψος του αγωγού. Επιπλέον παρατηρούμε ότι η ανάμειξη ξεκίνησε πριν από το μέσον του αγωγού, ενώ εμφανίζεται πιο έντονα η επίδραση της κλίσης του μαγνητικού πεδίου καθώς τα νανοσωματίδια φαίνονται να στροβιλίζονται. Στην προσομοίωση (d) τα νανοσωματίδια φαίνεται να δημιουργούν επιπλέον “στρώματα” νανοσωματιδίων.

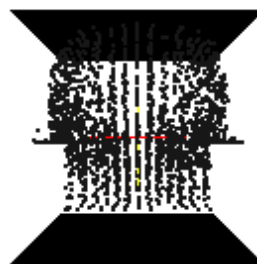
Στις εικόνες (e), (f) τα νανοσωματίδια δεν έχουν κατανεμηθεί ομοιόμορφα στον αγωγό. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι η ανάμειξη έχει ξεκινήσει αρκετά πριν από το μέσον του αγωγού ενώ η επίδραση

της κλίσης του μαγνητικού πεδίου είναι έντονη καθώς τα νανοσωματίδια φαίνονται να στροβιλίζονται και να δημιουργούν παραβολικό προφίλ. Από τα στιγμιότυπα των προσομοιώσεων παρατηρούμε ότι η κατανομή των νανοσωματιδίων επηρεάζεται από  $\nabla B$ . Πιο συγκεκριμένα η ανάμειξη ξεκινάει πιο γρήγορα όσο αυξάνεται  $\nabla B$  ενώ δημιουργούνται και 'στρώματα' νανοσωματιδίων γεγονός που σημαίνει και μη ομοιόμορφη κατανομή σωματιδίων στον αγωγό.



**Εικόνα 1.** Διασπορά των νανοσωματιδίων υπό συνθήκες προσομοίωσης  $B=0.6T$ ,  $F=5Hz$ , (a)  $\nabla B = 5T/m$ , (b)  $\nabla B = 6T/m$ , (c)  $\nabla B = 7T/m$ , (d)  $\nabla B = 8T/m$ , (e)  $\nabla B = 9T/m$ , (f)  $\nabla B = 10T/m$ .

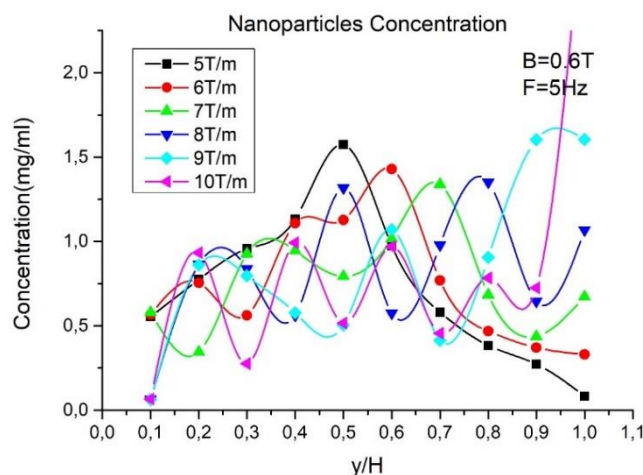
Στην Εικόνα 2 παρουσιάζεται η θέση των νανοσωματιδίων μέσα στον αγωγό κατά την φάση της ανάμειξης των ρευστών. Με το συγκεκριμένο στιγμιότυπο γίνεται αντιληπτό ότι τα νανοσωματίδια καταλαμβάνουν όλο το εύρος του αγωγού κατά την διεύθυνση του άξονα  $x$ .



**Εικόνα 2.** Προβολή της θέσης των νανοσωματιδίων στον άξονα  $x$  κατά την ανάμειξη υπό συνθήκες  $B=0.6T$ ,  $F=5Hz$ ,  $\nabla B = 5T/m$ .

Στο Γράφημα 1 παρουσιάζεται η συγκέντρωση των σωματιδίων για δεδομένο μαγνητικό πεδίο ( $B=0.6T$ ) και συχνότητα ( $F=5Hz$ ) συναρτήσει του άξονα  $y$  του αγωγού. Ουσιαστικά εξετάστηκε η επίδραση της κλίσης του μαγνητικού πεδίου ( $\nabla B$ ) στην κίνηση των νανοσωματιδίων. Η τιμές  $\nabla B$  που μελετήθηκαν, κυμάνθηκαν από (5-10)T/M. Για να είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε την συγκέντρωση και να οπτικοποιήσουμε τα αποτελέσματα, χωρίσαμε τον αγωγό σε δέκα ίσα μέρη κατά τον άξονα  $y$ . Τέλεια ανάμειξη θα είχαμε όταν η συγκέντρωση θα παρέμενε σταθερή σε κάθε

τμήμα γεγονός που θα υποδείκνυε ότι τα σωματίδια διασκορπίστηκαν ομοιόμορφα στον αγωγό. Όπως φαίνεται στο Γράφημα 1 η αύξηση της κλίσης του μαγνητικού πεδίου επηρεάζει την κίνηση των σωματιδίων μη κατανέμοντας τα ομοιόμορφα στον αγωγό. Τα αποτελέσματα του Γραφήματος συνάδουν με τα στιγμιότυπα των προσομοιώσεων της Εικόνας 1.



**Γράφημα 1.** Συγκέντρωση των νανοσωματιδίων στον αγωγό σε σχέση με το ύψος του αγωγού.

## ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Σε αυτή την εργασία διερευνήσαμε εάν ο καθαρισμός του νερού από βαρέα μέταλλα με την χρήση μαγνητικών νανοσωματιδίων σε μικροροϊκά συστήματα είναι εφικτός. Από τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν για δεδομένο μαγνητικό πεδίο ( $B=0.6T$ ) και συχνότητα ( $F=5Hz$ ), ο αναμίκτης λειτούργησε ικανοποιητικά καθώς επιτεύχθηκε η καθοδήγηση των νανοσωματιδίων και η διασπορά τους στον αγωγό. Επιπλέον, παρατηρήθηκε ότι η αύξηση της κλίσης του μαγνητικού πεδίου επηρεάζει σε σημαντικό βαθμό την κίνηση των σωματιδίων. Ουσιαστικά η αύξηση  $\nabla B$  σημαίνει ταυτόχρονα και την μη σωστή λειτουργία του αναμίκτη με τις συγκεκριμένες διαστάσεις.

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] J. Foley et al. Science 309 (2005) 570–574.
- [2] I. Falconer, A. Humpage. J. Environ. Res. Public Health 2 (2005) 43–50.
- [3] F. Li, X. Li, C. Liu, T. Liu. J. Hazard Mater. 149 (2007) 199–207.
- [4] D. da-Silva et al. Colloid Interface Sci. 324 (2008) 205–211.
- [5] Y. Shen et al. Sep. Purif. Technol. 68 (2009) 312–319.
- [6] T. Indira, P. Lakshmi. Int. J. Pharm. Sci. Nanotechnol. 3 (2010) 1035–1042.
- [7] X. Qu, P. Alvarez, Q. Li. Water Res. 47 (2013) 3931–3946.
- [8] E. Karvelas, N. Lampropoulos, T. Karakasidis, I. Sarris. Desalin. Water Treat. 99 (2017) 27–33.
- [9] N. Lampropoulos, E. Karvelas, I. Sarris. Available online: <https://arxiv.org/abs/1504.03490>
- [10] E. Karvelas, N. Lampropoulos, I. Sarris. Comp. Methods Progr. Biomed. 142 (2017) 21–30.
- [11] E. Tijskens, H. Ramon, J. Baerdemaeker. Sound Vib. 266 (2003) 493–514.