



UvA-DARE (Digital Academic Repository)

Multi-scale simulations with complex automata: in-stent restenosis and suspension flow

Lorenz, E.

Publication date
2010

[Link to publication](#)

Citation for published version (APA):

Lorenz, E. (2010). *Multi-scale simulations with complex automata: in-stent restenosis and suspension flow*. [Thesis, fully internal, Universiteit van Amsterdam].

General rights

It is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), other than for strictly personal, individual use, unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Disclaimer/Complaints regulations

If you believe that digital publication of certain material infringes any of your rights or (privacy) interests, please let the Library know, stating your reasons. In case of a legitimate complaint, the Library will make the material inaccessible and/or remove it from the website. Please Ask the Library: <https://uba.uva.nl/en/contact>, or a letter to: Library of the University of Amsterdam, Secretariat, Singel 425, 1012 WP Amsterdam, The Netherlands. You will be contacted as soon as possible.

Samenvatting

Na een introductie die onderzoek naar de meerschallige aard van complexe systemen motiveert, wordt in het eerste deel van het proefschrift het abstracte concept Complexe Automaten (CxA) voorgesteld als een nieuwe aanpak om zulke systemen te modelleren. In dit deel worden meerschallige koppelingen geïdentificeerd en worden passende koppelingssjablonen geopperd op basis van een classificatie aan de hand van een schaalscheidingsafbeelding en submodel-uitvoeringslusen. Ten einde ook andere onderzoekers een eenvoudig middel te bieden om meerschallige simulaties op te zetten is er een software framework op basis van het concept CxA ontwikkeld. De resulterende meerschallige koppelingsbibliotheek en -omgeving (MUSCLE) implementeert het executiemodel van een CxA en maakt daarmee op een eenvoudige manier gedistribueerd berekenen van meerschallige modellen mogelijk. De auteur is er zeker van dat het concept CxA van grote waarde is bij het modelleren van complexe systemen waarin verschillende processen op verschillende ruimte-tijd schalen een rol spelen. In feite bewijst dit proefschrift de toepasbaarheid van dit concept door simulaties van twee verschillende meerschallige systemen te presenteren die zijn gemodelleerd in deze geest.

Als eerste voorbeeld van een meerschallig model wordt er een model van het biomedische fenomeen in-stent restenose (ISR) beschreven. Het model is met behulp van MUSCLE ontwikkeld om de invloed van bloedstroming op dit proces te bestuderen. De betrokken subprocessen zijn geïdentificeerd op de schaalafbeelding samen met hun type koppelingen. De gecomplementeerde submodellen worden met voldoende detail beschreven. Er wordt enigszins uitgeweid over de vorming van thrombus in de vroege stadia van ISR en hier wordt een nieuw versimpeld thrombus model voor voorgesteld. Aan het eind van dit hoofdstuk worden de resultaten van de executies van de 2D en 3D ISR CxA's gepresenteerd en besproken en wordt er aangetoond dat het mogelijk is om de karakteristieken van in-stent restenose te reproduceren. Het model zal binnenkort verder worden ontwikkeld en de auteur is overtuigd dat het model leidt tot een uitbreiding van inzicht in het oorspronkelijke probleem.

Het tweede meerschallige systeem dat in dit proefschrift wordt beschreven is een niet-Browniaanse harde-bollensuspensie. De macroscopische emergente reologie wordt bepaald door de details van de wisselwerking tussen deeltjes en vloeistof en van deeltjes onderling. Het is een voorbeeld van systemen waarbij de typische ruimtelijke schaal op het niveau van de deeltjes veel kleiner is dan die van de macroscopische proporties. De schalen kunnen gesplitst worden met behulp van de hiërarchische meerschallige methode (HMM) waarin de suspensie op de macroschaal wordt behandeld als een niet-Newtoniaanse vloeistof terwijl lokale eigenschappen

van macroscopische velden de invoer zijn voor een volledige suspensie-simulatie. Op beide niveaus wordt de raster-Boltzmann methode gebruikt als model voor de vloeistoffase. Het naar boven en naar beneden schalen van waarden met betrekking tot viscositeit en diffusiteit wordt besproken. De resultaten worden gepresenteerd in vergelijking met observaties van experimentele resultaten en analytische oplossingen voor reeds bekende niet-Newtoniaanse modellen van de stroming van suspensies. In dit hoofdstuk wordt aangetoond dat het concept CxA helpt bij het identificeren van de relevante schalen en met de formulering naar een executiemodel. Met het gestelde multischaal model wordt de berekening meerdere ordes van grootte versneld, niet alleen door de betrokken schalen te splitsen maar ook doordat er zo intrinsiek gebruik gemaakt wordt van de rotationele en Galileïsche symmetrien. Dit is nog uitgebreid met een op maat gemaakte implementatie van een database met een interpolatie- en extrapolatiefunctionaliteit.

Uiteraard lossen concepten niet alles op dus blijven er meerdere uitdagingen verborgen in de technische details van de gebruikte methode bij de implementatie van een model. In dit proefschrift worden twee grote verbeteringen gegeven voor het simuleren van volledig opgeloste suspensies met behulp van de LBM. Ten eerste zijn de Lees-Edwards grensvoorwaarden (LEbc) ontwikkeld om de bijwerkingen van muren in een Couette-type schuifstroom op de microstructuur tegen te gaan. Het kan worden aangetoond dat door LEbc's te gebruiken het afschuifverdikkende gedrag van harde-bollensuspensies wordt verlengd in vergelijking met resultaten van Couette-stroming. Ten tweede wordt er een correctie gegeven op het momentum-uitwisselingsalgoritme dat wordt gebruikt in regelmatig toegepaste LBM suspensiemethodes, die de Galileïsche invariantie van de deeltjesdynamica herstelt.

Om de gestelde methodes te valideren alsmede ten gevolge van de auteur's wetenschappelijke interesse in suspensie-reologie, worden in het laatste hoofdstuk de bovengenoemde verbeterde methodes gebruikt om het gedrag van de ruimtelijke schaal in harde-bollensuspensies toenemende schuiving te onderzoeken, voor verschillende verhoudingen van vaste of vloeibare inhoud. Gewoonlijk vormen zich bij een hoge afschuifsnelheid clusters van hydrodynamisch interagerende deeltjes, wat afschuifverdikking veroorzaakt. Clustergrootte-distributies zijn gemeten en vergeleken met experimentele resultaten en theoretische modellen. Er kan een schaal-verband worden gevonden tussen de gebruikte viscositeit en de typische clustergrootte, wat de aanname bevestigt dat clustering de belangrijkste oorzaak is van afschuifverdikking. Gegeven deze bevindingen wordt er in dit hoofdstuk een statistisch model voorgesteld voor de vorming van clustergrootte-distributies, afhankelijk van de afschuifsnelheid, de inhoudsverhouding vast/vloeibaar en de dichtheidsverhouding vast/vloeibaar. Op basis van de dynamiek van een botsingsmodel voor twee deeltjes wordt de vorming en het opbreken van deeltjesclusters gemodelleerd. Het model leidt tot clustergrootte-distributies die goed in overeenstemming zijn met andere metingen.