

**Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ**

***Εργαστήριο Βιορρευτομηχανικής & Βιοϊατρικής  
Τεχνολογίας***



---

**Διπλωματική Εργασία**

**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΡΟΗΣ ΡΕΥΣΤΟΥ ΜΕ  
ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ ΣΕ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΕΙΣ ΜΕ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ  
EULER**

**ΑΝΤΩΝΟΠΟΥΛΟΣ ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ**

---

Επιβλέπων:

Καθηγητής ΤΣΑΓΓΑΡΗΣ ΣΩΚΡΑΤΗΣ

ΑΘΗΝΑ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2011







## Ευχαριστίες

Θερμές ευχαριστίες θα ήθελα να απευθύνω στον Καθηγητή και Διευθυντή του Εργαστηρίου Βιορευστομηχανικής και Βιοϊατρικής Τεχνολογίας, κ. Σωκράτη Τσαγγάρη, για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε αναθέτοντας μου την εκπόνηση αυτής της εργασίας και τη συμβολή του στην αντιμετώπιση διαφόρων δυσκολιών. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Διευθυντή του εργαστηρίου Θερμοϋδραυλικής Ανάλυσης και Πολυφασικών Ροών του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. Δημόκριτος, Δρ. Χρήστο Χουσιάδα (Ερευνητής Α') και τον Δρ. Παναγιώτη Νεοφύτου για την επιστημονική και υλικοτεχνική τους στήριξη κατά την παραμονή μου στο εργαστήριό τους.

Επιπλέον, ιδιαίτερα θερμά θα ήθελα να ευχαριστήσω τους υποψήφιους διδάκτορες του εργαστηρίου, κα. Μαρίκα Πηλού και κ. Βαγγέλη Μακρή, με τους οποίους συνεργάστηκα πολύ στενά καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας εργασίας, για τις συμβουλές, τα εργαλεία, την υπομονή και τη στήριξή τους σε καθημερινή βάση ώστε να ολοκληρωθεί αυτή η εργασία παρά τις όποιες δυσκολίες. Τέλος, ευχαριστώ όλα τα υπόλοιπα μέλη του εργαστηρίου για τη φιλοξενία που μου έδειξαν στο χώρο εργασίας τους καθώς και το στενό φιλικό και οικογενειακό μου περιβάλλον για τη στήριξή τους όλο αυτό το χρόνο.



## Περίληψη

Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας, μελετήθηκε η ροή αερολύματος σε διακλαδούμενους αγωγούς με μεθόδους υπολογιστικής ρευστομηχανικής. Στις προσομοιώσεις θεωρήθηκε μονοδιάσπαρτο αερόλυμα με εύρος διαμέτρου σωματιδίων από 1 έως 10  $\mu\text{m}$ , για το οποίο η αδράνεια και η βαρύτητα αποτελούν μη αμελητέους μηχανισμούς εναπόθεσης. Για το λόγο αυτό, οι μηχανισμοί αυτοί συμπεριλήφθηκαν στη Γενική Εξίσωση Δυναμικής Σωματιδίων (ΓΕΔΣ) με περιγραφή κατά Euler, η οποία περιγράφει τη μεταφορά και διάχυση του αερολύματος. Υπάρχοντες κώδικες του εργαστηρίου και εμπορικό πακέτο λογισμικού χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή της γεωμετρίας και του πλέγματος και, στη συνέχεια, για την εύρεση του πεδίου ροής του ρευστού και της συγκέντρωσης των σωματιδίων.

Υπολογίστηκε το ολικό και τοπικό κλάσμα εναπόθεσης των σωματιδίων στις γενιές G3-G4 του αναπνευστικού συστήματος με βάση το μοντέλο Weibel. Γεωμετρικές παράμετροι του προβλήματος θεωρήθηκαν η γωνία της διακλάδωσης ( $30^\circ$ ,  $60^\circ$  και  $90^\circ$ ), το σχήμα της διατομής (τετραγωνικό και κυκλικό) και η συμμετρία των διακλαδούμενων αγωγών ως προς τον κύριο αγωγό. Επίσης μελετήθηκε η επίδραση που έχουν στην εναπόθεση παράμετροι της ροής, όπως ο αριθμός Reynolds (εύρος μεταξύ 100 έως 1788) και το προφίλ ταχύτητας στην είσοδο του αγωγού (ομοιόμορφο και παραβολικό). Τέλος, εξετάστηκε η επίδραση που έχουν το μέγεθος των σωματιδίων και η βαρύτητα.

Τα αποτελέσματα επαληθεύτηκαν με πειραματικά δεδομένα πάνω σε μονή συμμετρική διακλάδωση. Παρατηρήθηκε πως, στην περίπτωση της συμμετρικής διακλάδωσης, η εναπόθεση εντοπίζεται κυρίως στην περιοχή της καρίνας, γεγονός που αποδίδεται στην αδρανειακή πρόσκρουση των σωματιδίων. Απόρροια αυτού είναι ότι η εναπόθεση εξαρτάται ουσιαστικά από ένα μόνο παράγοντα, τον αριθμό Stokes, με τις γεωμετρικές και ροϊκές παραμέτρους να έχουν δευτερεύουσα σημασία. Για τις ασύμμετρες διακλαδώσεις, λόγω μειωμένης αδρανειακής πρόσκρουσης στην καρίνα, παρατηρήθηκε ότι οι προαναφερθείσες παράμετροι επηρεάζουν αισθητά πλέον την εναπόθεση, η οποία όμως περιορίζεται σε αρκετά χαμηλότερα επίπεδα σε σχέση με τις συμμετρικές διακλαδώσεις.





## Abstract

In this work, the flow of aerosols in bifurcations was studied using Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques. Monodisperse aerosols with size range between 1 to 10  $\mu\text{m}$  were considered, for which the inertial and gravitational effects cannot be neglected. Therefore, these mechanisms were incorporated in the General Dynamics Equation (GDE) of particles, which describes the convection and diffusion of particles in an Eulerian formulation. In-house codes and commercial software were used to create the geometry and grid, and subsequently solve for the fluid flow field and the particle concentration.

In particular, the total and local deposition efficiencies and patterns of aerosol particles in bifurcating airways G3 - G4 of Weibel's respiratory tract model were calculated. The geometric parameters considered consisted of the bifurcation angle ( $30^\circ$ ,  $60^\circ$  and  $90^\circ$ ), the cross-section (square and circular) and the symmetry of the secondary airways with respect to the main airway. Furthermore, the effect of flow parameters, such as the fluid Reynolds number (ranging between 100 and 1788) and the velocity profile at the inlet of the airway were also studied. Finally, the effect of particle size and gravity were considered.

The results were validated with experimental data on single bifurcating airways. It was observed that, in the case of symmetric bifurcations, the deposition of particles was located mainly at the area of the carinal ridge, due to inertial impaction. As a result, deposition was found to be depended mainly on a single factor, the Stokes number, whereas the geometric and flow parameters had a minor effect on the deposition efficiency. In the case of asymmetric bifurcations, due to the reduced inertial impaction mechanism, the aforementioned parameters seem to be of increased importance and affect deposition efficiency. However, deposition efficiency was found to be considerably smaller for the asymmetric cases, in comparison to the symmetric ones.



## Πρόλογος

Η μελέτη της ροής αιωρούμενων σωματιδίων εντός του αναπνευστικού συστήματος είναι μεγάλης σημασίας για την εκτίμηση του κινδύνου από την εναπόθεση μικρο- και νανο-σωματιδίων στον οργανισμό και της απόδοσης των εισπνεόμενων φαρμακευτικών σκευασμάτων. Στην πρώτη περίπτωση, μπορεί να εκτιμηθεί ο κίνδυνος από την εργασιακή έκθεση σε αιωρούμενα σωματίδια, τον μολυσμένο ατμοσφαιρικό αέρα ή το κάπνισμα, ώστε να συνδεθεί η τοξικότητα των σωματιδίων με τις πιθανές βλάβες στις περιοχές εναπόθεσής τους. Στη δεύτερη περίπτωση, γνωρίζοντας την τοπική συγκέντρωση και εναπόθεση σωματιδίων στο αναπνευστικό σύστημα μπορούμε να βελτιστοποιήσουμε τις δοσολογίες φαρμάκων και να επιτύχουμε αύξηση της δόσης σε συγκεκριμένα σημεία, τα οποία συμβάλλουν καθοριστικά στην καταπολέμηση της ασθένειας.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούμε τεχνικές της υπολογιστικής ρευστομηχανικής για να προσομοιώσουμε τη ροή του συστήματος αέρα-σωματιδίων (αερόλυμα) εντός διακλαδούμενων αγωγών. Για την ακρίβεια, χρησιμοποιείται μια Euler-Euler περιγραφή του συστήματος αέρα-σωματιδίων. Επιλύονται οι εξισώσεις Navier-Stokes για την εύρεση του πεδίου ταχύτητας και πίεσης του ρευστού ενώ η συγκέντρωση προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης ισορροπίας πληθυσμού (Population Balance Equation – PBE) των σωματιδίων. Η μελέτη αυτή είναι παραμετρική ως προς τη γεωμετρία των αγωγών (συμμετρία, γωνία διακλάδωσης, μορφή διατομής), τα χαρακτηριστικά της ροής του ρευστού (αριθμός Reynolds, κατανομή της ταχύτητας στην είσοδο του αγωγού) και το μέγεθος (διάμετρος) των σωματιδίων. Για τους σκοπούς της εργασίας χρησιμοποιήθηκαν υπάρχοντες υπολογιστικοί κώδικες, οι οποίοι προσαρμόστηκαν όπου χρειάστηκε στις ανάγκες της συγκεκριμένης εφαρμογής, αλλά και εμπορικά διαθέσιμα υπολογιστικά εργαλεία.

Η δομή της εργασίας είναι αυτή που ακολουθεί. Αρχικά δίνεται μια βιβλιογραφική ανασκόπηση των εργασιών της ροής αερολύματος εντός διακλαδούμενων αγωγών και παρουσιάζεται η θεωρία που διέπει τα συστήματα αέρα σωματιδίων. Στη συνέχεια, περιγράφονται τα αριθμητικά μοντέλα για την κατασκευή της γεωμετρίας και την επίλυση του πεδίου ροής του ρευστού και του πεδίου συγκέντρωσης των σωματιδίων. Έπειτα, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις τόσο για το ρευστό όσο και για τα σωματίδια. Τέλος, δίδονται συγκενρωμένα τα συμπεράσματα της μελέτης και η βιβλιογραφία που χρησιμοποιήθηκε.



# Περιεχόμενα

Ευχαριστίες .....	5
Περίληψη .....	7
Abstract .....	9
Πρόλογος .....	11
Ιστορική αναδρομή .....	15
1 Αναπνευστικό Σύστημα .....	19
1.1 Μορφολογία πνεύμονα .....	19
1.2 Αναπνοή .....	21
2 Θεωρία πολυφασικών ροών και αερολυμάτων .....	23
2.1 Βασικές έννοιες και ορισμοί .....	24
2.2 Αριθμός Stokes .....	24
2.3 Αραιές και πυκνές ροές .....	25
2.4 Σύζευξη Φάσεων .....	25
2.5 Μέγεθος σωματιδίων – Κατανομές .....	26
2.6 Αερολύματα .....	29
2.6.1 Τι είναι το αερόλυμα .....	29
2.6.2 Δυναμική αερολύματος – Διεργασίες .....	30
2.6.3 Γενική Εξίσωση Δυναμικής των Σωματιδίων .....	35
3 Αριθμητικά μοντέλα .....	39
3.1 Κατασκευή Γεωμετρίας - Πλεγματοποίηση .....	39
3.1.1 Διακλαδώσεις τετραγωνικής διατομής .....	41
3.1.2 Διακλαδώσεις κυκλικής διατομής (PRB model) .....	43

3.2	Επίλυση πεδίου ροής.....	51
3.2.1	<i>Επιλυόμενες εξισώσεις και αριθμητικά σχήματα.....</i>	51
3.3	Σύγκριση πεδίων ροής.....	56
3.4	Επίλυση πεδίου συγκεντρώσεως σωματιδίων.....	57
3.4.1	<i>Επιλυόμενες εξισώσεις και αριθμητικά σχήματα.....</i>	58
3.4.2	<i>Φιλτράρισμα λύσης και απομάκρυνση αρνητικών τιμών.....</i>	62
3.4.3	<i>Υπολογισμός συνολικής και τοπικής εναπόθεσης.....</i>	63
4	Αποτελέσματα ροών.....	65
4.1	Ασύμμετρες διακλαδώσεις τετραγωνικής διατομής.....	65
4.1.1	<i>Αποτελέσματα ροής ρευστού για διακλάδωση 60°.....</i>	66
4.2	Συμμετρική διακλάδωση κυκλικής διατομής.....	79
5	Αποτελέσματα σωματιδίων.....	87
5.1	Ασύμμετρες διακλαδώσεις.....	87
5.2	Συμμετρικές διακλαδώσεις – Σύγκριση με πειραματικά δεδομένα.....	96
6	Συμπεράσματα.....	107
7	Βιβλιογραφία.....	109

## Ιστορική αναδρομή

Στη βιβλιογραφία υπάρχουν δημοσιευμένες πειραματικές, αναλυτικές και υπολογιστικές μελέτες σχετικά με την κίνηση και εναπόθεση σωματιδίων σε διακλαδώσεις, μονές, διπλές ή και πολλαπλές. Το πλήθος των εμπλεκόμενων παραμέτρων, φαινομένων αλλά και μεθόδων που χρησιμοποιούνται έχει ως αποτέλεσμα τη δυσκολία ανάδειξης αρκετά γενικών συμπερασμάτων σχετικά με τη συμπεριφορά αερολυμάτων σε πολύπλοκες γεωμετρίες, όπως είναι οι διακλαδώσεις.

Οι αγωγοί κυκλικής διατομής σε στροφή διαφόρων μοιρών (γωνιές ή bends) ήταν από τις πρώτες γεωμετρίες στις οποίες μελετήθηκε η μεταφορά σωματιδίων εντός ρευστού. Ενδεικτικά αναφέρουμε την πειραματική εργασία των Pui et al (1987) και τις αναλυτικές και υπολογιστικές μελέτες των Cai & Yu (1988) και Cheng & Wang (1981). Τα συμπεράσματα αυτών των μελετών χρησιμοποιούνταν ως προέκταση και για διακλαδούμενους αγωγούς, θεωρώντας τη διακλάδωση ως συνένωση δύο γωνιών.

Παρόλα αυτά, πειραματικά αποδείχθηκε από τους Kim & Inglesias (1989) ότι τέτοια μοντέλα δεν περιγράφουν ρεαλιστικά τα χαρακτηριστικά εναπόθεσης στην περίπτωση των αεραγωγών με διακλαδώσεις. Προς αυτή την κατεύθυνση, διεξήχθησαν πειράματα πάνω σε διάφορες διατάξεις διακλαδώσεων και για διάφορες συνθήκες ροής και σωματιδίων ώστε να προκύψουν πιο ικανοποιητικά δεδομένα. Τα πειραματικά δεδομένα για αυτές τις περιπτώσεις δεν είναι πολλά όμως είναι μεγάλης σημασίας για την επικύρωση των αποτελεσμάτων των υπολογιστικών μοντέλων.

Στην παρούσα εργασία έγινε σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα των Kim et al (1994) , οι οποίοι κατέληξαν σε αρκετά ενδιαφέροντα συμπεράσματα κάνοντας μετρήσεις σε συμμετρική διακλάδωση κυκλικής διατομής με σωματίδια διαμέτρων 3  $\mu\text{m}$ , 5  $\mu\text{m}$  και 7  $\mu\text{m}$  και μεταβάλλοντας τη γωνία της διακλάδωσης, το λόγο διαμέτρων του κύριου προς τους θυγατρικούς αγωγούς και τον αριθμό Reynolds. Πιο συγκεκριμένα, αναφέρουν ότι ο κύριος μηχανισμός εναπόθεσης των σωματιδίων διαμέτρου  $d_p > 1\mu\text{m}$  σε μια διακλάδωση είναι η αδρανειακή πρόσκρουση (impaction), και μάλιστα με το μεγαλύτερο ποσοστό να συγκεντρώνεται σε μια μικρή περιοχή, στο τοίχωμα ακριβώς στο σημείο διαχωρισμού του κεντρικού αγωγού (carinal ridge). Επιπλέον, έδειξαν ότι η συνολική εναπόθεση εξαρτάται σχεδόν αποκλειστικά από τον αριθμό Stokes και αυξάνεται μονοτονικά με αυτόν, καθώς βρέθηκε ότι οι διάφορες γωνίες διακλάδωσης, λόγοι διαμέτρων και αριθμός Reynolds της ροής δεν επηρεάζουν σημαντικά το τελικό αποτέλεσμα παρά μόνο ίσως την τοπική εναπόθεση και κίνηση των σωματιδίων λόγω δευτερευουσών ροών. Σε αντίστοιχα αποτελέσματα είχαν

καταλήξει νωρίτερα και οι Johnston et al (1977). Σημασία επίσης φαίνεται να έχει και η κατανομή των σωματιδίων στην είσοδο του αγωγού, με το παραβολικό προφίλ να παρουσιάζει μεγαλύτερη εναπόθεση από το ομοιόμορφο, λόγω της αυξημένης αδρανειακής πρόσκρουσης στο carinal ridge στην περίπτωση αυτή.

Στα ίδια συμπεράσματα καταλήγουν οι Kim & Fisher (1999) και Comer et al (2001) σε πειράματα που έκαναν σε διπλές διακλάδωσεις, οι οποίοι αναφέρουν επιπλέον ότι η μεγαλύτερη εναπόθεση παρουσιάζεται στην πρώτη διακλάδωση, με αυτή της δεύτερης να είναι μεν συγκρίσιμη αλλά μικρότερη και περισσότερο εξαρτώμενη από τις τοπικές συνθήκες ροής (περιπτώσεις ασύμμετρης ροής κοκ).

Εκτός από πειράματα, έχουν διεξαχθεί πλήθος μελετών χρησιμοποιώντας υπολογιστικά μοντέλα για την προσομοίωση τόσο της ροής του ρευστού όσο και της κίνησης των σωματιδίων, με συνηθέστερες αυτές που χρησιμοποιούν προσεγγίσεις κατά Lagrange. Συνήθως αυτά συμφωνούν με τα πειραματικά δεδομένα, αφού η συμφωνία αυτή είναι και προϋπόθεση αποδοχής ενός υπολογιστικού μοντέλου. Χαρακτηριστικά αναφέρουμε την εργασία των Zhang et al (2000), οι οποίοι έδειξαν ότι για διπλές διακλάδωσεις, η εναπόθεση στην 1<sup>η</sup> διακλάδωση εξαρτάται σχεδόν αποκλειστικά από τον Stokes και δεν επηρεάζεται, λόγω συμμετρίας, από ασυμμετρίες στην ροή παρακάτω, με την αδρανειακή εναπόθεση να παίζει πάλι κυρίαρχο ρόλο. Πρόσθετα, η εργασία των Balashazy & Hoffman (1993), στην οποία γίνεται χρήση μεθόδων Monte Carlo, συμφωνεί με τα πειραματικά αποτελέσματα των Kim & Inglesias (1989) και επιπλέον εντοπίζει τις διαφορές με τα πειραματικά των Johnston et al (1977) στο διαφορετικό σχήμα του carinal ridge (οξεία γωνία και καμπύλο. Επίσης, οι Longest & Vinchurkar (2007) έδειξαν ότι, παρόλο που η κατανομή των σωματιδίων στην είσοδο δεν επηρεάζει σημαντικά τη συνολική εναπόθεση, μπορεί να προκαλέσει σημαντικές διαφοροποιήσεις στην τοπική εναπόθεση κατά μήκος του αγωγού και πρότειναν τη χρήση κατανομής σωματιδίων στην είσοδο *ανάλογης* με την ροή μάζας του ρευστού για να έχουμε ρεαλιστικότερες τοπικές κατανομές εναπόθεσης.

Τέλος, αν και είναι σύνηθες να θεωρείται στρωτή ροή, έχουν γίνει εργασίες που προσομοιώνουν και τα φαινόμενα τύρβης, τα οποία και αυξάνουν ελαφρώς την εναπόθεση και μερικές φορές είναι απαραίτητα για να πετύχουμε πιο ρεαλιστικές λύσεις, όπως αυτές των Longest & Oldham (2006) και Longest & Vinchurkar (2007).

Τα συμπεράσματα αυτά έρχονται μερικές φορές σε αντίθεση με κάποιες θεωρητικές και υπολογιστικές μελέτες, στις οποίες παράμετροι όπως ο Re σε τρισδιάστατες ροές φαίνεται να επηρεάζουν σημαντικά την εναπόθεση, όπως έδειξαν οι Lee & Goo (1992) και Asgharian & Anjilvel (1994). Οι τελευταίοι, χρησιμοποιώντας διακλάδωση τετραγωνικής διατομής και υπολογιστικά μοντέλα έδειξαν ότι, για σωματίδια διαμέτρου  $> 10\mu\text{m}$ , εάν αμεληθεί η



αδράνεια και ληφθεί υπόψη η επίδραση της βαρύτητας τότε η εναπόθεση είναι ανεξάρτητη του Reynolds και του προφίλ ταχύτητας στην είσοδο. Στην περίπτωση όμως που ληφθεί υπόψη μόνο η αδράνεια, τότε για το παραβολικό προφίλ υπάρχει ισχυρή εξάρτηση από τον  $Re$  της ροής, και πιο συγκεκριμένα, όσο αυξάνεται ο  $Re$  αυξάνεται και η εναπόθεση. Ωστόσο, οι Kim et al (1994) υποστηρίζουν ότι οι διαφορές αυτές μπορεί να οφείλονται στην πολυπλοκότητα των φυσικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα είτε επειδή αυτά δεν μπορούν να περιγραφούν ρεαλιστικά από την θεωρία ή επειδή υπερεκτιμώνται κάποιοι παράγοντες όπως η επίδραση της δευτερεύουσας ροής, χωρίς αυτό να ισχύει στην πραγματικότητα.

Τα μοντέλα που παρουσιάσαμε παραπάνω βασίζονται σε περιγραφή Lagrange για τη μελέτη της σωματιδιακής φάσης. Εξάιρεση αποτελεί η εργασία των Longest & Oldham (2008), όπου χρησιμοποιείται η περιγραφή Euler με διάφορες προσεγγίσεις της ταχύτητας των σωματιδίων δίπλα στο τοίχωμα. Οι τελευταίοι καταλήγουν στο ότι με τη χρήση αναλυτικής προσέγγισης για την ταχύτητα μεταξύ του τοιχώματος και του σημείου ελέγχου δίπλα στο τοίχωμα, η λύση προσεγγίζει πολύ ικανοποιητικά τα πειραματικά δεδομένα για τη συνολική και τοπική εναπόθεση.

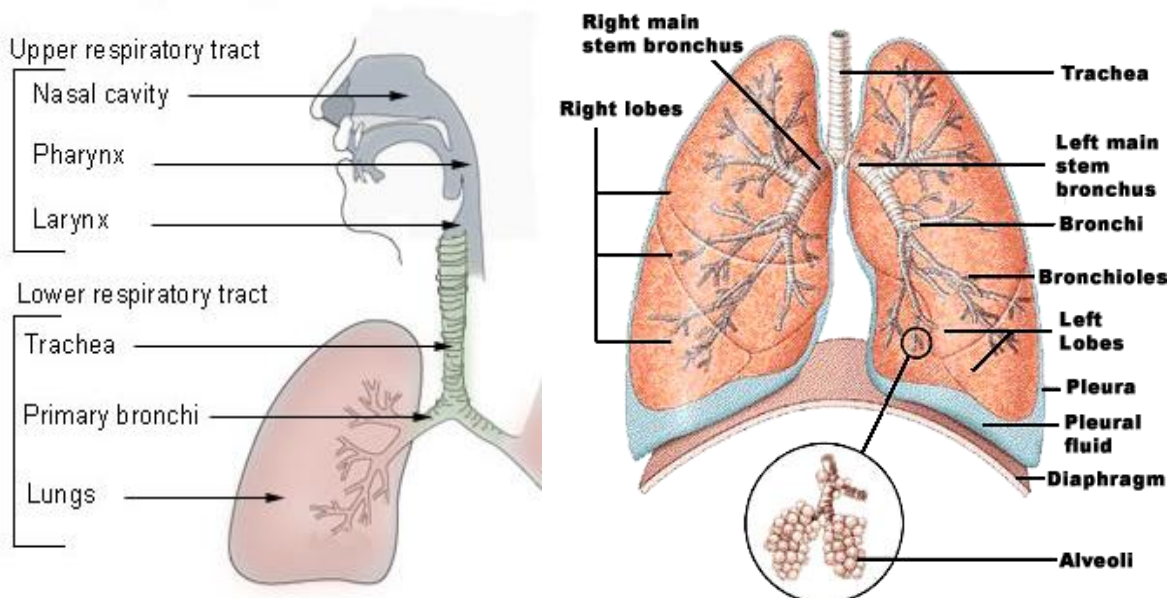


# 1 Αναπνευστικό Σύστημα

Ένα μεγάλο μέρος της παρούσης εργασίας αναφέρεται σε προσομοιώσεις διακλαδούμενων αγωγών με διαστάσεις και συνθήκες ροής που αναφέρονται στις γενιές 3 και 4 του αναπνευστικού συστήματος, συνεπώς θεωρείται χρήσιμη μια αναφορά στη μορφολογία της αναπνευστικής οδού (respiratory tract) καθώς και στην περιγραφή της αναπνοής.

## 1.1 Μορφολογία πνεύμονα

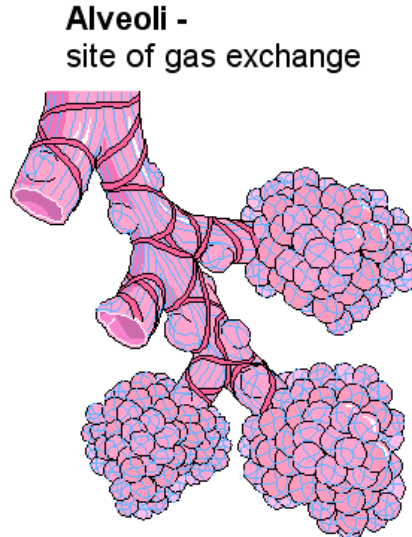
Ο εισπνεόμενος αέρας διέρχεται αρχικά μέσα από το *ανώτερο αναπνευστικό σύστημα* (upper respiratory tract) ή *εκτός-θώρακα περιοχή*, το οποίο περιλαμβάνει τη *ρινική κοιλότητα* (nasal cavity), το *λάρυγγα*, το *φάρυγγα* και το *στόμα*. Ακολουθεί η *θωρακική περιοχή*, που αποτελείται από την *τραχεία* (trachea), *τους βρόγχους* (bronchi), *τα βρογχιόλια* (bronchioles) και τις *κυψελίδες* (alveoli). Στο επάνω μέρος της τραχείας βρίσκονται οι *φωνητικές χορδές*, οι οποίες ως δευτερεύοντα ρόλο έχουν να εμποδίζουν την είσοδο τροφής πέρα του φάρυγγα προς αυτή. Η τραχεία μαζί με τους βρόγχους και τα βρογχιόλια (εκτός των αναπνευστικών που βρίσκονται στο κατώτερο τμήμα) αποτελούν την *τραχειοβρογχική περιοχή* (tracheobronchical region).



**Σχήμα 1.1** Το ανθρώπινο αναπνευστικό σύστημα – Διακλαδούμενη δομή πνεύμονα

Η τραχεία έχει μήκος περίπου 11 cm και διάμετρο 2-2.5 cm και στο τέλος της διαιρείται στους δύο κύριους βρόγχους, έναν για κάθε πλευρά του πνεύμονα (ή λοβό). Στη συνέχεια, αυτοί οι βρόγχοι διακλαδίζονται, συνήθως διχοτομικά και με φθίνουσες διαστάσεις μέχρι να καταλήξουν στα βροχιόλια και έπειτα στους κυψελιδικούς πόρους. Κάθε πνευμονικός λοβός περιέχει περίπου 60 με 80 βροχιόλια και το καθένα από αυτά 2 με 11 κυψελιδικούς πόρους, οι οποίοι είναι σωλήνες με λεπτά τοιχώματα. Το πλήθος των διακλαδώσεων των βρόγχων ποικίλει από 8 έως 25, με μέσο όρο 23, οι οποίες και χωρίζουν τους βρόγχους σε γενιές.

Στις διακλαδώσεις που δημιουργούνται στους κυψελιδικούς πόρους σχηματίζονται οι κυψελιδικοί σάκοι ή αεροθύλακες. Οι κυψελίδες σχηματίζονται ως προέκταση των αεροθυλάκων. Πρόκειται για κοιλότητες διαμέτρου περίπου 100 - 300 μm, οι οποίες περιβάλλονται από τριχοειδή αγγεία, όπως φαίνεται και στο ακόλουθο σχήμα. Κάθε άνθρωπος έχει περίπου 300 εκατομμύρια κυψελίδες, με συνολική επιφάνεια περίπου τα 60 m<sup>2</sup>.



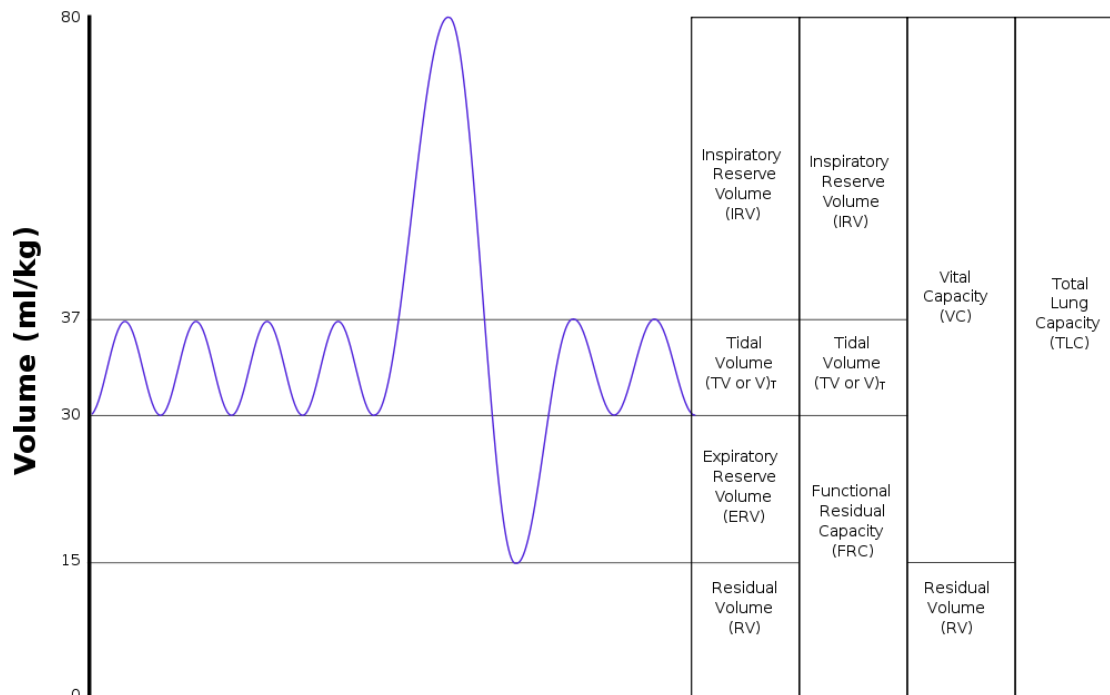
**Σχήμα 1.2** Λεπτομέρεια κυψελίδων (είναι ορατά και τα τριχοειδή αγγεία)

Η ανταλλαγή των αερίων γίνεται αποκλειστικά στις κυψελίδες. Τα υπόλοιπα τμήματα του πνεύμονα (τραχεία, βρόγχοι κτλ.) απλά συνδέουν τις κυψελίδες με το περιβάλλον, γι'αυτό και λέγονται *ζώνη σύνδεσης* και καταλαμβάνουν περίπου το 80% του συνολικού όγκου του πνεύμονα.

## 1.2 Αναπνοή

Αναπνοή ονομάζεται η ανταλλαγή αερίων μεταξύ του οργανισμού με το περιβάλλον, κατά την οποία προσλαμβάνεται οξυγόνο και αποβάλλεται διοξείδιο του άνθρακα. Η αναπνοή είναι μια αρκετά πολύπλοκη διαδικασία για την οποία χρησιμοποιούνται δύο συστήματα, ένα εξωτερικό και ένα εσωτερικό. Το εξωτερικό σύστημα είναι υπεύθυνο για τη διατήρηση σταθερής συγκέντρωσης αερίων στο αίμα, σε μακροσκοπική κλίμακα, ενώ το εσωτερικό ρυθμίζει την κάθε αναπνοή ξεχωριστά με νευρολογικά σήματα. Κατά τη ρύθμιση διακρίνουμε δύο στάδια: ο έλεγχος του ρυθμού της αναπνοής και ο ολικός αερισμός των πνευμόνων, που εξαρτάται από το ρυθμό αλλά και το βάθος κάθε αναπνοής.

Τα χαρακτηριστικά της αναπνοής εξαρτώνται από το επίπεδο σωματικής άσκησης, την κατάσταση της υγείας, το εάν το άτομο είναι καπνιστής ή όχι κ.α. Τα προηγούμενα επηρεάζουν σε μεγάλο βαθμό και την εναπόθεση των σωματιδίων στο αναπνευστικό σύστημα, οπότε παραμετρικές μελέτες και πειράματα παρουσιάζουν μεγάλο ενδιαφέρον. Βασικές παράμετροι της φυσιολογίας της αναπνοής είναι ο *αναπνεόμενος όγκος*  $V_T$  (tidal volume), ο οποίος είναι της τάξεως των  $500\text{ cm}^3$  /ανά αναπνοή, καθώς και η *αναπνευστική συχνότητα*  $f$  (breathing frequency) σε εισπνοές ανά λεπτό, από την οποία προκύπτει και η *περίοδος αναπνοής*  $T$ . Άλλα μεγέθη που χρησιμοποιούνται συχνά είναι η *ολική πνευμονική χωρητικότητα*  $TLC$  (total lung capacity), δηλαδή ο όγκος του αέρα που βρίσκεται εντός των πνευμόνων τη στιγμή της μέγιστης εισπνοής, ο *υπολειπόμενος όγκος*  $RV$  (residual volume), δηλαδή ο όγκος που παραμένει στους πνεύμονες αμέσως μετά τη μέγιστη εκπνοή, η *ζωτική χωρητικότητα*  $VC$  (vital capacity), δηλαδή ο μέγιστος όγκος αέρα που μπορεί να εκπνεύσει το άτομο μετά από μια μέγιστη εισπνοή, ο *εισπνεόμενος όγκος αέρα*  $IRV$  (inspiratory reserve volume), δηλαδή το κλάσμα του όγκου των πνευμόνων που καταλαμβάνεται κατά την εισπνοή και η *λειτουργική υπολειπόμενη χωρητικότητα*  $FRC$  (functional residual capacity), δηλαδή ο όγκος του αέρα που παραμένει συνεχώς εντός των πνευμόνων, ακόμα και μετά την εκπνοή. Στο διάγραμμα του σχήματος [1.3] βλέπουμε κάποιες τυπικές τιμές για τα κλάσματα του όγκου που αναφέρθηκαν παραπάνω καθώς και μια ποιοτική σύγκριση μεταξύ τους.



**Σχήμα 1.3** Τα κλάσματα όγκου του αέρα που εισέρχεται στους πνεύμονες

Σχετικά με τα εισπνεόμενα σωματίδια ορίζεται το μέγεθος *εισπνευσιμότητα* ή *εισπνεόμενο κλάσμα IF* (inhalability ή inhalable fraction) ως ο λόγος της συγκέντρωσης σωματιδίων του αέρα που εισπνέεται προς αυτή του περιβάλλοντος. Απώλειες στη συγκέντρωση αυτών των σωματιδίων σημειώνονται στις στροφές των γραμμών ροής στην είσοδο της αναπνευστικής οδού, λόγω αδράνειας. Γενικά, για σωματίδια διαμέτρου μικρότερης των  $2\mu m$  εισπνέεται το 100% του όγκου τους (δηλαδή  $IF = 1$ ) ενώ για μεγαλύτερα το ποσοστό αυτό μειώνεται αρκετά. Ειδικές συνθήκες περιβάλλοντος μπορούν να μεταβάλλουν την τιμή του εισπνεόμενου κλάσματος, ενδεικτικά, για άνεμο χαμηλής έντασης εισπνέεται περίπου το 50% ενώ για ισχυρό άνεμο το ποσοστό μπορεί να ξεπεράσει ακόμα και το 100%.

Τέλος, επειδή θα ασχοληθούμε και με τη ροή του αέρα στο αναπνευστικό, επισημαίνεται ότι ενώ στους αρχικούς αεραγωγούς η ροή είναι τυρβώδης, έχει αποδειχτεί (βλ. εργασίες των Comer et al (2001), Longest & Vinchurkar (2007), Longest & Oldham (2008)) μετά από πλήθος πειραμάτων ότι στην τραχειοβρογχική περιοχή μπορεί να θεωρηθεί στρωτή χωρίς μεγάλα σφάλματα, συμπέρασμα που θα αξιοποιηθεί στη συνέχεια.

## 2 Θεωρία πολυφασικών ροών και αερολυμάτων

Ο όρος *φάση* αναφέρεται σε μια στερεή, υγρή ή αέρια κατάσταση της ύλης. Μια *πολυφασική ροή* αποτελεί τη ροή ενός μείγματος δύο ή περισσοτέρων φάσεων, όπως π.χ. φυσαλίδες αερίων σε υγρά, σταγόνες σε αέρια κ.ο.κ. Υπάρχουν διάφορες κατηγοριοποιήσεις των πολυφασικών ροών, οι σημαντικότερες των οποίων είναι οι εξής:

- Αναμειγμένες και διαχωρισμένες ροές (dispersed and separate flows): Η πρώτη κατηγορία αφορά ροές στις οποίες η μια φάση εντοπίζεται διακριτά μέσα στην άλλη, χωρίς τα στοιχεία της να συνδέονται π.χ. φυσαλίδες μέσα σε νερό, σταγόνες σε αέρα. Αντίθετα, στις διαχωρισμένες ροές οι δύο φάσεις ξεχωρίζουν από μια γραμμή επαφής, χωρίς να αναμειγνύονται περαιτέρω.
- Ροές υγρών-αερίων (Gas-Liquid flows): Πρόκειται για την κίνηση φυσαλίδων σε υγρό μέσο ή σταγόνων σε αέριο μέσο. Τέτοιες ροές συναντούμε συχνά σε βιομηχανικές εφαρμογές, όπως π.χ. στα συστήματα παραγωγής ενέργειας, μηχανές εσωτερικής καύσης, ατμοπαραγωγούς και εναλλάκτες θερμότητας.
- Ροές αερίων-στερεών (Gas-Solid flows): Συνήθως πρόκειται για ροή αερίου στο οποίο υπάρχουν αναμειγμένα (στερεά) σωματίδια. Ροές τέτοιου είδους συναντούμε επίσης συχνά σε πνευματικά συστήματα, συστήματα συγκέντρωσης ρυπαντών, όπως π.χ. είναι οι φυγοκεντρικοί συλλέκτες και τα ηλεκτροστατικά φίλτρα, καύση άνθρακα για παραγωγή ενέργειας κτλ. Στην ειδική περίπτωση που η στερεή φάση είναι ακίνητη, έχουμε το πρόβλημα ροής ρευστού μέσω πορώδους υλικού, το οποίο εμπίπτει σε αυτή την κατηγορία.
- Ροές υγρών-στερεών (Liquid-Solid flows): Συνηθισμένα παραδείγματα τέτοιων ροών είναι η ροή της λάσπης, η μεταφορά ορυκτών και άνθρακα και άλλες εφαρμογές που παρουσιάζουν μεγάλο ενδιαφέρον από τη σκοπιά του μηχανικού. Στην περίπτωση που η στερεή φάση είναι δε μετακινείται έχουμε μια ακόμα περίπτωση ροής μέσω πορώδους υλικού.
- Τριφασικές ροές (Three-phase flows): Συνδυάζοντας τις παραπάνω περιπτώσεις προκύπτουν τριφασικές ροές, για τις οποίες λίγα πράγματα μπορούμε να βρούμε στη βιβλιογραφία.

Μέχρι πρόσφατα όλες οι μελέτες των παραπάνω εφαρμογών βασίζονταν κυρίως σε εμπειρικά δεδομένα. Τελευταία όμως, με την ανάπτυξη των υπολογιστών και των υπολογιστικών μεθόδων, γίνεται δυνατή η ανάλυση και επίλυση τέτοιων προβλημάτων που βοηθούν το σχεδιασμό, έλεγχο και βελτίωση της δουλειάς του μηχανικού και είναι πολλά υποσχόμενη στο προσεχές μέλλον.

## 2.1 Βασικές έννοιες και ορισμοί

Διακρίνουμε τη *σωματιδιακή φάση* (dispersed phase) και το *φέρων ρευστό* (carrier fluid).

Σημαντικό μέγεθος για τις πολυφασικές ροές είναι η *συγκέντρωση μάζας* (mass concentration) της σωματιδιακής φάσης, που δίνεται από τη σχέση:

$$C = \frac{\bar{\rho}_d}{\rho_c} \quad [1]$$

δηλαδή ο λόγος της μάζας της σωματιδιακής φάσης προς τη μάζα του φέροντος ρευστού στο μείγμα. Υπάρχουν και άλλοι ορισμοί για τη συγκέντρωση (πολλοί συγγραφείς χρησιμοποιούν δικά τους σύμβολα), όπως και ο παρακάτω συχνά χρησιμοποιούμενος ως συγκέντρωση:

$$Z = \frac{\dot{m}_d}{\dot{m}_c} \quad [2]$$

που λέγεται και φορτίο (loading) και αποτελεί το λόγο της ροής μάζας της σωματιδιακής φάσης προς αυτή του φέροντος ρευστού.

## 2.2 Αριθμός Stokes

Άλλη πολύ σημαντική παράμετρος για τις πολυφασικές ροές είναι ο αδιάστατος αριθμός *Stokes*, που ορίζεται ως:

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f} \quad [3]$$

όπου  $\tau_p$  ο χαρακτηριστικός χρόνος αντίδρασης της ορμής (ταχύτητας) του σωματιδίου και  $\tau_f$  ο χαρακτηριστικός χρόνος του πεδίου ροής. Ο  $\tau_p$  ονομάζεται *χρόνος χαλάρωσης* και αποτελεί το χρόνο που χρειάζονται τα σωματίδια για να αποκτήσουν την ταχύτητα της ροής



καθώς αυτή μεταβάλλεται και ορίζεται ως  $\tau_p = \rho_p d^2 / 18\mu_f$ , όπου  $\rho_p$  η πυκνότητα των σωματιδίων,  $d$  η διάμετρος τους και  $\mu_f$  η δυναμική συνεκτικότητα του ρευστού.

Από φυσικής σκοπιάς, για  $St \ll 1$ , δηλαδή όταν ο χρόνος αντίδρασης των σωματιδίων είναι αρκετά μικρότερος του χαρακτηριστικού χρόνου της ροής, τα σωματίδια έχουν τη δυνατότητα να προσαρμοσθούν γρήγορα στις μεταβολές της ροής, με αποτέλεσμα η ταχύτητά τους και αυτή της ροής να είναι σχεδόν ίσες. Αντιθέτως, για  $St \gg 1$ , τα σωματίδια δεν προλαβαίνουν να ακολουθήσουν τις μεταβολές της ροής και τελικά δεν επηρεάζονται σε μεγάλο βαθμό από αυτές (αδρανειακή επίδραση).

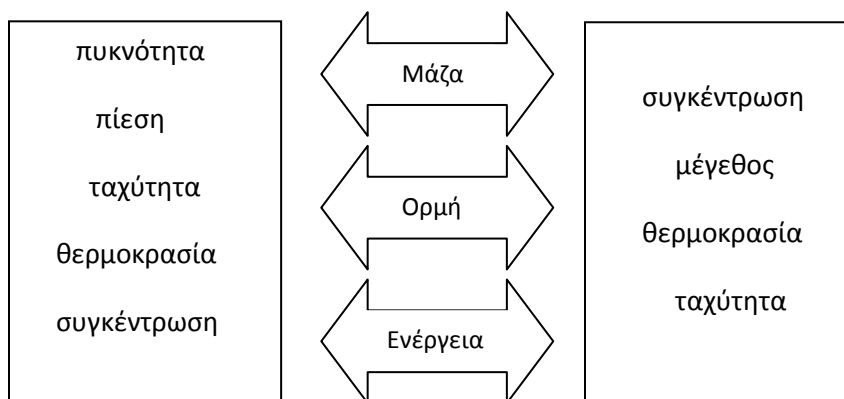
### 2.3 Αραιές και πυκνές ροές

Ένας τελευταίος διαχωρισμός μεταξύ πολυφασικών ροών μπορεί να γίνει σχετικά με το λόγο  $\frac{\tau_p}{\tau_c}$ , όπου  $\tau_c$  ο μέσος χρόνος μεταξύ των συγκρούσεων των σωματιδίων. Έτσι, όταν ο λόγος αυτός είναι μεγαλύτερος της μονάδας έχουμε *αραιές ροές* (disperse flows), στις οποίες ο κύριος μηχανισμός μεταφοράς των σωματιδίων είναι η κίνηση του ρευστού, ενώ για τιμές μικρότερες τις μονάδας έχουμε τις *πυκνές ροές* (dense flows), όπου επικρατούν οι κινήσεις λόγω συγκρούσεων των σωματιδίων μεταξύ τους.

### 2.4 Σύζευξη Φάσεων

Στην ανάλυση των πολυφασικών ροών είναι σημαντική η έννοια της *σύζευξης* (coupling). Έτσι, εάν μόνο η μια φάση επιδρά στην άλλη και όχι αντίστροφα έχουμε *μονή-σύζευξη* (one-way coupling), ενώ αν υπάρχει αλληλεπίδραση μεταξύ των φάσεων έχουμε *διπλή-σύζευξη* (two-way coupling).

Όπως είναι γνωστό, το φέρον ρευστό περιγράφεται από την πυκνότητα, θερμοκρασία, πίεση, πεδίο ταχυτήτων και στην περίπτωση αέριας φάσης και από τη συγκέντρωση. Η σωματιδιακή φάση περιγράφεται από τη συγκέντρωση, το μέγεθος των σωματιδίων, τη θερμοκρασία και το αντίστοιχο πεδίο ταχυτήτων. Η αλληλεπίδραση μεταξύ των φάσεων, όπως φαίνεται και στο σχήμα [2.1] προκύπτει από τη μεταφορά *μάζας* (μέσω προσθήκης-αφαίρεσης), *ορμής* (μέσω συγκρούσεων και δυνάμεων μεταξύ σωματιδίων και ρευστού) και *ενέργειας* (κυρίως μέσω μεταφοράς θερμότητας) και τις αντίστοιχες εξισώσεις. Υπάρχουν διάφοροι μηχανισμοί μεταφοράς στους οποίους θα ανεφερθούμε συνοπτικά στη συνέχεια.



**Σχήμα 2.1** Η σύζευξη μεταξύ φάσεων

Σε ειδικές περιπτώσεις μπορούμε να αμελήσουμε τη σύζευξη ενός ή περισσότερων μορφών μεταφοράς χάριν ευκολίας και απλοποίησης του προβλήματος. Παραδείγματος χάριν, για μικρές συγκεντρώσεις αιωρούμενων σωματιδίων και υψηλούς  $St$ , οι συζεύξεις μάζας και ορμής μπορούν να αμεληθούν, και ακόμα για ροές αερίων η σύζευξη ενέργειας. Σε αυτές τις περιπτώσεις καταλήγουμε σε προβλήματα μονής-σύζευξης, τα οποία και λύνονται με ευθύ τρόπο.

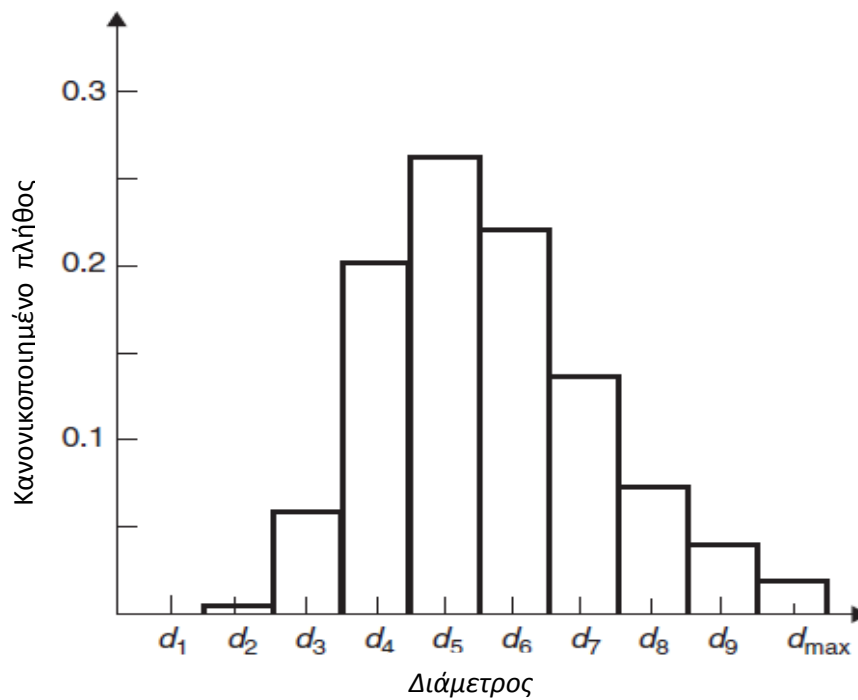
## 2.5 Μέγεθος σωματιδίων – Κατανομές

Το μέγεθος<sup>1</sup> των σωματιδίων/σταγονιδίων αποτελεί σημαντικότερη παράμετρο για τη μελέτη των πολυφασικών ροών. Αφού ασχολούμαστε με πληθυσμούς μεγάλου αριθμού σωματιδίων, τα οποία και δεν είναι δυνατό να έχουν ακριβώς το ίδιο μέγεθος, είναι απαραίτητη η χρήση εννοιών που προσδιορίζουν τη διασπορά και κατανομή μεγέθους. Έτσι, μια κατανομή σωματιδίων μπορεί να είναι *μονοδιάσπαρτη* (monodisperse), στις περιπτώσεις που η τυπική απόκλιση του πληθυσμού είναι μικρότερη του 10%, οπότε μπορούμε να

<sup>1</sup> Αξίζει εδώ να σημειωθεί ότι με τον όρο «μέγεθος», εννοούμε συνήθως τη διάμετρο ενός σωματιδίου, το οποίο μπορεί να θεωρηθεί ιδανικά σφαιρικό. Σε περίπτωση που ληφθεί υπόψη η μη-σφαιρικότητα (λόγω σημαντικών τάσεων – δυνάμεων ή φυσικών διαδικασιών) εισάγεται ειδικός συντελεστής μεγέθους  $\chi$  (dynamic shape factor), ο οποίος δίνει τη διάμετρο σφαίρας ίδιου όγκου με το σωματίδιο. Άλλες χαρακτηριστικές διαμέτροι που χρησιμοποιούνται κατά περίπτωση είναι η *διάμετρος Stokes* και η *αεροδυναμική διάμετρος*. Σε αρκετές περιπτώσεις δε, αντί της διαμέτρου, χρησιμοποιείται ο όγκος του σωματιδίου, όπως για παράδειγμα όταν έχουμε συσσωμάτωση, αφού, σε αντίθεση με τη διάμετρο, παραμένει σταθερός.

θεωρήσουμε σωματίδια ενός μεγέθους, και σε *πολυδιάσπαρτη* (polydisperse) σε αντίθετη περίπτωση.

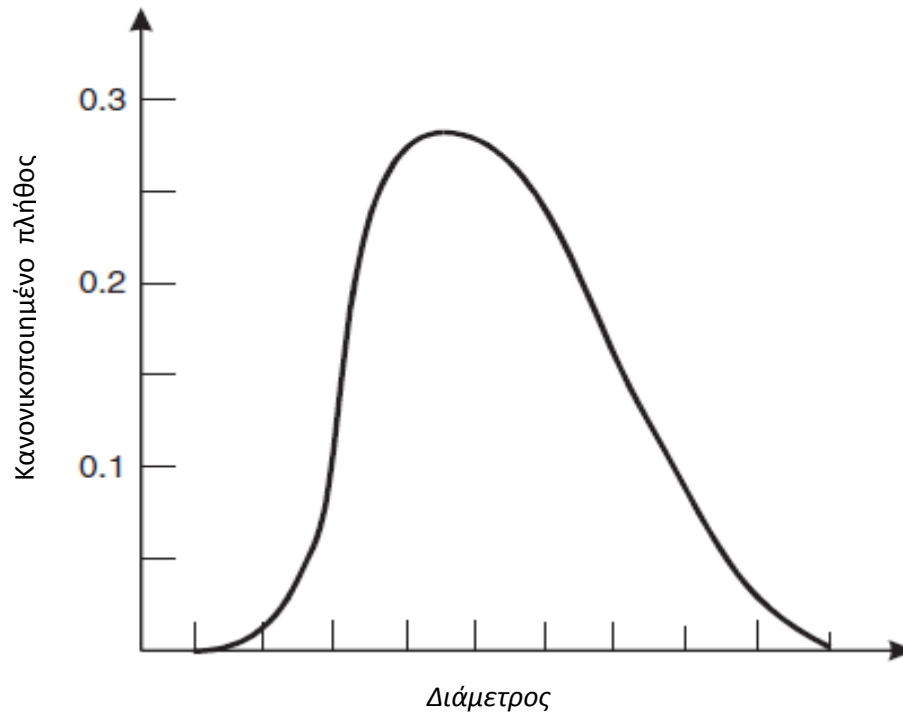
Οι κατανομές χωρίζονται επίσης σε *συνεχείς* (continuous) και *διακριτές* (discrete). Στις διακριτές κατανομές, που συνήθως προκύπτουν από μετρήσεις (π.χ. φωτογραφικές μεθόδους), ο πληθυσμός χωρίζεται σε *τάξεις*, στις οποίες θεωρείται πληθυσμός σταθερού μεγέθους. Τα σωματίδια που εμπίπτουν σε κάθε τάξη καταμετρώνται και ο αριθμός τους διαιρείται με το σύνολο. Έτσι προκύπτει το *ιστόγραμμα*, παράδειγμα του οποίου βλέπουμε στο σχήμα [2.2].



**Σχήμα 2.2** Ιστόγραμμα διακριτής κατανομής σωματιδίων

Είναι προφανές ότι χρειαζόμαστε πολλές μετρήσεις και τάξεις ώστε να πάρουμε μια ικανοποιητική, ομαλή καμπύλη. Εξαιτίας των δυσκολιών του εν λόγω εγχειρήματος, είναι απαραίτητος ένας συμβιβασμός ανάμεσα στην ακρίβεια και το κόστος.

Αν το πλήθος των τάξεων τείνει στο άπειρο, τότε παίρνουμε τη συνεχή κατανομή. Γενικώς, δε χρησιμοποιούνται συνεχείς κατανομές λόγω της δυσκολίας που αναφέραμε προηγουμένως, είναι όμως συνήθης η χρήση διακριτών κατανομών, οι τιμές των οποίων θεωρούμε ότι ανήκουν πάνω στην καμπύλη μια συνεχούς κατανομής. Μια συνεχής κατανομή φαίνεται στο σχήμα [2.3].



**Σχήμα 2.3** Ιστόγραμμα συνεχούς κατανομής σωματιδίων

Κατά την ανάλυση των προαναφερθείσων κατανομών χρησιμοποιούνται στατιστικά μεγέθη (μέσες τιμές, αποκλίσεις, συναρτήσεις κ.ο.κ.), τα οποία δεν είναι αντικείμενο της παρούσης εργασίας. Ο ενδιαφερόμενος παραπέμπεται στη βιβλιογραφία για περισσότερες λεπτομέρειες, ενδεικτικά αναφέρουμε τα *Multiphase Flow Handbook* (2006), *Atmospheric Chemistry & Physics* και *Smoke, Dust and Haze* (1977).

## 2.6 Αερολύματα

Γενικώς, στη βιβλιογραφία συναντούμε εκτεταμένες αναφορές πάνω στα αερολύματα, στη φυσική των αλληλεπιδράσεων αερίων με σωματίδια, χημικές διεργασίες, μαθηματική μοντελοποίηση γενικών και πιο συγκεκριμένων προβλημάτων κ.ο.κ. Θα επιχειρήσουμε μια σύντομη αναφορά στα παραπάνω, δίνοντας μεγαλύτερη έμφαση στα θέματα που μας απασχόλησαν κατά την εκπόνηση της συγκεκριμένης εργασίας.

### 2.6.1 Τι είναι το αερόλυμα

Ο όρος *αερόλυμα* (αέρας+διάλυμα) αναφέρεται στη διασπορά και αιώρηση μικρών, στερεών ή υγρών σωματιδίων σε αέριο, συνήθως αέρα. Τα αερολύματα μπορεί να είναι αποτέλεσμα μετατροπής αερίων σε σωματίδια, αποσύνθεσης υγρών ή στερεών, επαναιώρησης σκόνης ή διάσπασης συσσωμάτων. Ανάλογα με την προέλευση ή και την περιοχή που τα συναντούμε, τα αερολύματα είναι γνωστά και ως καπνός (smoke), σκόνη (dust), αχλός (haze), αιθάλη (fume), ομίχλη (mist), φούμος (soot), ακόμα και βιολογική ύλη (ιοί, βακτήρια, μύκητες κτλ).

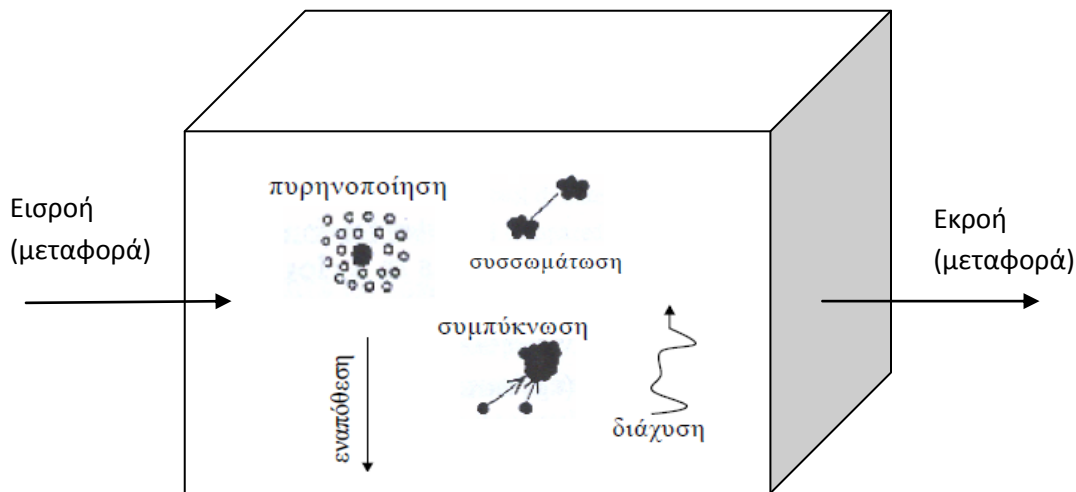
Χαρακτηριστικό των αερολυμάτων είναι η αρκετά διαλυμένη στερεή φάση (μάζα σωματιδίων συνήθως μικρότερη του 0.0001% της ολικής μάζας ή όγκου) καθώς και τα πολύ μικρού μεγέθους σωματίδια (κλίμακα τάξεως νανομέτρου μέχρι δεκάτου του χιλιοστού). Συνήθως χρησιμοποιούνται οι μονάδες του μικρομέτρου ( $\mu\text{m}$ ) ή νανομέτρου (nm) για τη διάμετρο των σωματιδίων. Γι' αυτό το λόγο μπορούμε να θεωρήσουμε το αερόλυμα ως διφασικό σύστημα *μονής-σύζευξης*, δηλαδή να υποθέσουμε ότι το φέρον αέριο επιδρά στη σωματιδιακή φάση και όχι το αντίστροφο.

Ανάλογα με το μέγεθος, διακρίνουμε τα σωματίδια σε *χονδρόκοκκα* (coarse)  $d_p > 2\mu\text{m}$  ή  $1\mu\text{m}$  και *λεπτόκοκκα* (fine)  $d_p < 2\mu\text{m}$  ή  $1\mu\text{m}$ . Παραδείγματα χονδρόκοκκων σωματιδίων είναι η αιωρούμενη λόγω ανέμων σκόνη στην ατμόσφαιρα, η βιολογική ύλη, η γύρη, ο καπνός και η στάχτη. Συνήθως, τα χονδρόκοκκα σωματίδια συναντώνται αιωρούμενα στην ατμόσφαιρα αν και έχουν μικρότερο χρόνο ζωής από τα λεπτόκοκκα, λόγω βαρυτικής επικάθισης.

Τα λεπτόκοκκα σωματίδια χωρίζονται περαιτέρω σε αυτά που προέρχονται από *πυρηνοποίηση* (nucleation) και λέγονται *υπέρλεπτα* (ultrafine) συνήθως  $d_p < 0.1\mu\text{m}$  και στα προερχόμενα από *συσσωμάτωση* (accumulation), με  $0.1\mu\text{m} < d_p < 2\mu\text{m}$  και είναι συνήθως παράγωγα καύσης, πυρηνοποίησης αερίων και γενικά βιογενών και ανθρωπογενών εκπομπών. Μια τελευταία υποκατηγορία που συναντούμε τελευταία, με την ανάπτυξη της νανο-τεχνολογίας είναι τα *νανοσωματίδια* (nanoparticles)  $d_p < 50 \div 100\text{nm}$ .

## 2.6.2 Δυναμική αερολύματος - Διεργασίες

Στη δυναμική του αερολύματος συμπεριλαμβάνονται όλες οι διαδικασίες που μεταβάλλουν τα χαρακτηριστικά, όπως είναι το μέγεθος και η χημική σύσταση, της σωματιδιακής φάσης. Αυτές λαμβάνουν χώρα ταυτόχρονα με τη ροή του αερολύματος και τις επιδράσεις του φέροντος αερίου στα σωματίδια. Οι κυριότεροι μηχανισμοί φαίνονται στο σχήμα [2.4] και περιγράφονται συνοπτικά στη συνέχεια.



**Σχήμα 2.4** Εσωτερικές και εξωτερικές διεργασίες αερολύματος σε στοιχειώδες όγκο

Οι διεργασίες<sup>2</sup> που μεταβάλλουν την κατανομή μεγέθους της σωματιδιακής φάσης χωρίζονται σε εσωτερικές (internal processes) και εξωτερικές (external processes). Ως εσωτερικές χαρακτηρίζονται αυτές που πραγματοποιούνται στο εσωτερικό ενός στοιχειώδους όγκου και περιλαμβάνουν τις συσσωμάτωση (coagulation), συσσώρευση (agglomeration), διάσπαση (fragmentation) και τις μετατροπές-αερίου-σε-στερεό (gas-to-particle conversion), δηλαδή συμπύκνωση (condensation), εξάτμιση (evaporation) και πυρηνοποίηση (nucleation). Στις εξωτερικές διεργασίες συγκαταλέγονται η μεταφορά (convection), διάχυση (diffusion), η

<sup>2</sup> Δεν αναφέρουμε εδώ τις χημικές αντιδράσεις που μπορεί να πραγματοποιούνται και είναι βασικός παράγοντας αλληλεπίδρασης του ρευστού με τα σωματίδια. Όταν απουσιάζουν αυτές, οι αναφερόμενες διεργασίες οφείλονται στη διαφορά συγκέντρωσης των δύο φάσεων. Για τα σωματίδια η συγκέντρωση αυτή υπολογίζεται στην επιφάνεια και είναι συνάρτηση της θερμοκρασίας και της πίεσης, ενώ για το φέρον ρευστό υπολογίζεται μακριά από το σωματίδιο και είναι ιδιότητα του ρευστού. Αν (ιδανικά) δεν υπάρχει διαφορά μεταξύ αυτών των συγκεντρώσεων, τότε δεν έχουμε καμία διεργασία.

κίνηση των σωματιδίων λόγω κλίσεων θερμοκρασίας, συγκέντρωσης και λοιπών μεγεθών του φέροντος αερίου και οι *δυνάμεις καθίζησης λόγω βαρύτητας* (sedimentation).

### 2.6.2.1 Συσσωμάτωση - Συσσώρευση

Κατά την κίνησή τους, τα σωματίδια συγκρούονται μεταξύ τους με αποτέλεσμα τη δημιουργία σωματιδίων μεγαλύτερου μεγέθους. Το φαινόμενο αυτό λέγεται συσσωμάτωση και διακρίνεται από τη συσσώρευση, κατά την οποία τα συγκρουόμενα σωματίδια συγκεντρώνονται κατά ομάδες και σχηματίζουν «αλυσίδες», χωρίς δηλαδή τη δημιουργία ενός τελικού σώματος.

Οι βασικές αιτίες της κίνησης αυτής που προκαλεί τη συσσωμάτωση είναι η *διάχυση κατά Brown* (Brownian diffusion), η οποία είναι εντονότερη για σωματίδια  $d_p < 1\mu m$  και τότε το φαινόμενο είναι γνωστό και ως συσσωμάτωση κατά *Smoluchowski*. Άλλος μηχανισμός συσσωμάτωσης είναι λόγω των διατμητικών τάσεων (shear-induced) που αναπτύσσονται καθώς τα σωματίδια εισέρχονται στις ανομοιομορφίες του ροϊκού πεδίου. Οι τελευταίες έχουν μεγαλύτερη επίδραση στα σωματίδια με  $d_p < 2\mu m$ .

Συνοπτικά, ο Smoluchowski, με την παραδοχή σφαιρικών σωματιδίων, έδειξε ότι η χρονική μεταβολή μιας διακριτής συνάρτησης κατανομής μεγέθους  $n_k$ , δίνεται από την εξίσωση:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K(v_i, v_j) n_i n_j - n_k \sum_{i=1}^{\infty} K(v_i, v_j) n_i \quad [4]$$

όπου ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους δίνει το ρυθμό δημιουργίας σωματιδίων  $k$  από τη σύγκρουση των  $i, j$  και ο δεύτερος το ρυθμό μείωσης των σωματιδίων  $k$  λόγω των συγκρούσεων με τα υπόλοιπα. Η συνάρτηση  $K$  αποτελεί τη συνάρτηση συχνότητας των συγκρούσεων σωματιδίων μεγέθους  $i, j$ , σε μονάδες όγκου προς χρόνο.

### 2.6.2.2 Συμπύκνωση

Εδώ συγκαταλέγονται η απορρόφηση ή απώλεια μάζας του σωματιδίου μέσω της επιφάνειάς του λόγω συμπύκνωσης. Πρόκειται για πολύ σημαντικό μηχανισμό αφού επηρεάζει άμεσα το μέγεθος του σωματιδίου, που όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, αποτελεί βασική παράμετρο για τη συμπεριφορά της σωματιδιακής φάσης. Όταν έχουμε μεταφορά νερού με τη μορφή υδρατμών μιλάμε για *υγροσκοπική* συμπύκνωση, η οποία και πραγματοποιείται σε μεγάλο βαθμό στο αναπνευστικό σύστημα.

### 2.6.2.3 Πυρηνοποίηση

Πυρηνοποίηση είναι η διαδικασία στην οποία εμφανίζεται μια νέα φάση κατά της διάρκεια μιας πρώτου βαθμού μετατροπής φάσης. Η διαδικασία αυτή ενεργοποιείται θερμικά και απαιτείται η υπέρβαση ενός *φράγματος πυρηνοποίησης*. Η πυρηνοποίηση διακρίνεται σε *ομογενή* (homogenous) και *ετερογενή* (heterogenous). Κατά την ομογενή πυρηνοποίηση σχηματίζονται σωματίδια χωρίς να συμβάλλουν πυρήνες συμπύκνωσης ή ιόντα, όπως συναντούμε συχνά π.χ. κατά τη δημιουργία νανοσωματιδίων στα καυσαέρια μηχανών εσωτερικής καύσης ή στην ανώτερη ατμόσφαιρα. Αν υπάρχει ένα στερεό σώμα, στην επιφάνεια του οποίου ενεργοποιούνται μηχανισμοί πυρηνοποίησης τότε έχουμε την ετερογενή πυρηνοποίηση.

Είναι σημαντικό να πούμε ότι διεργασίες πυρηνοποίησης δε συναντώνται στο αναπνευστικό σύστημα λόγω ακατάλληλων συνθηκών (χαμηλές θερμοκρασίες).

### 2.6.2.4 Εναπόθεση

Κατά την αιώρηση ενός σωματιδίου στο ρευστό, λόγω διάχυσης και εξωτερικών δυνάμεων που ασκούνται πάνω του, αυτό τείνει να παρεκκλίνει από τις γραμμές ροής και να συγκρουστεί με τις επιφάνειες γύρω από τη ροή και συχνά να εναποτεθεί πάνω σε αυτές.

Η δύναμη αντίστασης (οπισθέλκουσα) που ασκείται από το αέριο στο σωματίδιο δίνεται από τη σχέση:

$$F_D = \frac{3\pi\mu_g u_p d_p}{C_c} \quad [5]$$

όπου  $\lambda$  η ελευθέρα διαδρομή του αερίου (mean free path), δηλαδή η μέση απόσταση που διανύουν τα μόρια του ρευστού μέχρι να συγκρουστούν,  $\mu_f$  η δυναμική συνεκτικότητα και  $u_p$  η ταχύτητα του σωματιδίου. Ο  $C_c$  είναι ο διορθωτικός όρος του *Cunningham* ή *συντελεστής ολίσθησης* (slip correction factor) και δίνεται από τη σχέση:

$$C_c = 1 + \frac{\lambda}{d_p} \left[ 2.34 + 1.05e^{(-0.39\frac{d_p}{\lambda})} \right] \quad [6]$$

Σύμφωνα με τη θεωρία του Stokes, η ροή του ρευστού μπορεί να θεωρηθεί συνεχής σε σχέση με αυτή των σωματιδίων. Ωστόσο, στην περίπτωση μικρών σωματιδίων, όταν η διάμετρος των σωματιδίων γίνεται συγκρίσιμη με το  $\lambda$ , η οπισθέλκουσα μειώνεται και ο  $C_c$  χρησιμοποιείται για να γίνει η διόρθωση αυτή. Ενδεικτικά, για σωματίδια διαμέτρου περίπου



1 $\mu m$  η διόρθωση λόγω ολίσθησης είναι της τάξεως του 15% , ενώ για πάνω από 10 $\mu m$  είναι αμελητέα.

#### 2.6.2.4.1 Καθίζηση

Ένας βασικός μηχανισμός εναπόθεσης προκύπτει από τη βαρυτική δύναμη που ασκείται πάνω στα σωματίδια, ιδιαίτερα όταν το φέρον ρευστό μπορεί να θεωρηθεί στάσιμο. Για σφαιρικά,στάσιμα σωματίδια και  $Re_p < 0.1$  ορίζεται η τελική ταχύτητα καθίζησης<sup>3</sup> (terminal velocity):

$$u_s = \frac{\rho_p d_p^2 g C_C}{18\mu_g} \quad [7]$$

ως η σταθερή ταχύτητα που αποκτά ένα σωματίδιο υπό την επίδραση του βαρυτικού πεδίου. Είναι προφανές από τη σχέση [7] ότι η ταχύτητα καθίζησης αυξάνεται όσο μεγαλώνει το σωματίδιο. Επισημαίνεται επίσης ότι τα αιωρούμενα σωματίδια αποκτούν πολύ γρήγορα την  $u_s$  οπότε μπορεί να υποτεθεί ότι κινούνται με αυτήν από τη στιγμή που θα εισέλθουν στο βαρυτικό πεδίο.

#### 2.6.2.4.2 Μοριακή διάχυση

Λόγω της συνεχούς σύγκρουσης των μορίων του ρευστού με τα σωματίδια, τα τελευταία αποκτούν τυχαία κίνηση, τη λεγόμενη κίνηση κατά *Brown*. Μακροσκοπικά, το αποτέλεσμα αυτής είναι η κίνηση των σωματιδίων από περιοχές με υψηλές συγκεντρώσεις προς περιοχές με χαμηλότερες που ονομάζεται διάχυση. Επίσης, διάχυση παρατηρείται και στις τυρβώδεις ροές λόγω δινών. Η ροή των σωματιδίων (αριθμός σωματιδίων/ $m^2 \text{ sec}$ ) λόγω διάχυσης δίνεται από το νόμο του *Ficks*:

$$J_p = -D_p \Delta n_p \quad [8]$$

όπου  $D_p$  ο συντελεστής μοριακής διάχυσης, που δίνεται από την εξίσωση *Stokes-Einstein*:

$$D_p = \frac{k_B T_f C_C}{3\pi\mu_f d_p} \quad [9]$$

---

<sup>3</sup> Ορίζεται ο αριθμός *Reynolds* της σωματιδιακής φάσης:  $Re_p = \frac{d_p u_p}{\nu_f}$  . Για ροές *Stokes* γύρω από σωματίδιο

συνήθως είναι  $Re_p \ll 1$

με  $k_B$  τη σταθερά Boltzmann και  $T_f$  η θερμοκρασία του περιβάλλοντος ρευστού.

Όπως φαίνεται και από την σχέση [9], για μικρά σωματίδια ο συντελεστής διάχυσης λαμβάνει μεγάλες τιμές οπότε και το φαινόμενο είναι έντονο. Τα αντίστροφο συμβαίνει στην περίπτωση μεγάλων σωματιδίων οπότε και μπορεί να αμεληθεί η διάχυση σε σχέση με άλλους μηχανισμούς εναπόθεσης.

#### 2.6.2.4.3 Αδράνειακή πρόσκρουση (*Impaction*)

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, τα σωματίδια, λόγω αδράνειας, δεν μπορούν να ακολουθήσουν πλήρως τις γραμμές ροής του ρευστού, λόγω χάρη κατά τις επιταχύνσεις ή επιβραδύνσεις, σε στροφές γύρω από τοιχώματα κ.ο.κ. Οι αποκλίσεις αυτές καταλήγουν συχνά σε *πρόσκρουση* των σωματιδίων με τα τοιχώματα, η οποία είναι βασικός παράγοντας εναπόθεσης. Γενικά, για σωματίδια διαμέτρου μεγαλύτερου του  $1\mu m$  τα αδρανειακά φαινόμενα δεν μπορούν να αμεληθούν.

Εισάγοντας πλέον τους διορθωτικούς συντελεστές  $C_C$  και  $\chi$  μπορούμε να ορίσουμε ξανά τον χρόνο χαλάρωσης σωματιδίου:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2 C_C}{18\mu_f \chi} \quad [10]$$

δηλαδή το χρόνο που χρειάζεται ένα σωματίδιο, ξεκινώντας από την ηρεμία, να φτάσει την τελική ταχύτητα του ρευστού, και τον αριθμό *Stokes*:

$$St = \frac{u_o \tau_p}{L} = \frac{\rho_p d_p^2 C_C u_o}{18\mu_g \chi L} \quad [11]$$

όπου  $u_o$  η χαρακτηριστική ταχύτητα και  $L$  το χαρακτηριστικό μήκος του πεδίου ροής.

### 2.6.3 Γενική Εξίσωση Δυναμικής των Σωματιδίων

Όλοι οι μηχανισμοί που επηρεάζουν τη φυσική συμπεριφορά του αερολύματος και περιγράφηκαν παραπάνω συμπεριλαμβάνονται στη Γενική Εξίσωση των Σωματιδίων (ΓΕΔΣ – GDE, General Dynamic Equation) :

$$(ΓΕΔΣ): \quad \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(n\mathbf{u}_p) = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{coag} + \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{g-p} \quad [12]$$

η οποία εκφράζει τις αλλαγές στην κατανομή μεγέθους των σωματιδίων στο χώρο και χρόνο λόγω εσωτερικών και εξωτερικών διεργασιών. Η ΓΕΔΣ αποτελεί προσέγγιση κατά Euler σε αντίθεση με την προσέγγιση κατά Lagrange, κατά την οποία λύνονται οι εξισώσεις κίνησης του σωματιδίου κατά την κίνησή του στο ρευστό. Στις διαφορές των δύο προσεγγίσεων θα αναφερθούμε σε επόμενο κεφάλαιο.

Στη θεωρία αερολυμάτων θεωρείται, με αρκετά ικανοποιητικά αποτελέσματα, ότι οι μηχανισμοί μεταφοράς δρουν ανεξάρτητα, δηλαδή ισχύει η αρχή της επαλληλίας. Η ταχύτητα των σωματιδίων μπορεί να προσεγγιστεί από την παρακάτω σχέση, χωρίς την επίδραση αδράνειας:

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u} - D\nabla \ln n + \mathbf{u}_{ext} \quad [13]$$

όπου  $D$  ο συντελεστής της Brownian διάχυσης,  $\mathbf{u}$  η ταχύτητα του ρευστού και  $\mathbf{u}_{ext}$  η ταχύτητα λόγω εξωτερικών παραγόντων (θερμοφόριση, βαρύτητα, ηλεκτροστατικό πεδίο κτλ).

Η γενική μορφή της ΓΕΔΣ (σχέση [12]) για μονοδιάσπαρτο πληθυσμό σωματιδίων αιωρούμένων σε ρευστό είναι:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(c\mathbf{u}_p) = \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{coag} + \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{g-p} \quad [14]$$

όπου  $C$  είναι η συγκέντρωση και  $\mathbf{u}_p$  η ταχύτητά των σωματιδίων. Θα εξετάσουμε μόνιμες περιπτώσεις μεταφοράς, οπότε αμελούμε το χρονικό όρο του αριστερού μέλους και τους όρους εσωτερικών διεργασιών του δεξιού μέλους. Τελικά, η εξίσωση [12] γίνεται:

$$\nabla(c\mathbf{u}_p) = 0 \quad [15]$$

Οι *Fernandez de la Mora & Rosner* (1982), θεωρώντας μόνιμη, ισοθερμική ροή, πυκνότητα σωματιδιακής φάσης αρκετά μεγαλύτερη από την πυκνότητα του ρευστού,

απουσία εξωτερικών δυνάμεων και την οπισθέλκουσα Stokes ( $Re_p \ll 1$ ), έλυσαν την εξίσωση ορμής των σωματιδίων με προσέγγιση 1<sup>ης</sup> τάξης για το χρόνο χαλάρωσης

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2 C_C}{18\mu_f \chi} \quad [16]$$

όπου  $\rho_p$  η πυκνότητα των σωματιδίων,  $d_p$  η διάμετρος τους,  $C_C$  ο συντελεστής Cunningham και  $\chi$  ο συντελεστής σχήματος των σωματιδίων. Οι δύο τελευταίοι όροι ισούνται με τη μονάδα για σφαιρικά σωματίδια μεγαλύτερα από 1 μm, οπότε κατέληξαν στην εξίσωση [17] για την ταχύτητα, η οποία συμπεριλαμβάνει διόρθωση 1<sup>ης</sup> τάξης λόγω αδράνειας:

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u} - D\nabla \ln c - \tau_p (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + O(\tau_p^2) \quad [17]$$

όπου  $D$  ο συντελεστής διάχυσης σωματιδίων Stokes – Einstein ( $D = k_B T_f / 3\pi\mu_f d_p$ ). Αν ληφθεί υπόψη και η επίδραση της βαρυτικής δύναμης η εξίσωση [17] γίνεται:

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u} - D\nabla \ln c - \tau_p (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{c}_s + O(\tau_p^2) \quad [18]$$

όπου

$$\mathbf{c}_s = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \left( 1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \mathbf{g} \quad [19]$$

με  $\mathbf{g}$  το διάνυσμα της βαρύτητας (Drossinos & Housiadas, 2006). Για τα αερολύματα που εξετάζουμε ισχύει ότι  $\rho_f \ll \rho_p$  οπότε η εξίσωση [19] γίνεται:

$$\mathbf{c}_s = \tau_p \mathbf{g} \quad [20]$$

Τελικά, η ταχύτητα των σωματιδίων χωρίζεται σε δύο όρους: έναν όρο διάχυσης  $\mathbf{u}_d$ , που εξαρτάται αποκλειστικά από τις κλίσεις της συγκέντρωσης, και έναν όρο μεταφοράς  $\mathbf{u}_c$ , που όπως βλέπουμε και στην εξίσωση [21], εξαρτάται μόνο από την ταχύτητα του ρευστού και τις κλίσεις της.

$$\mathbf{u}_c = \mathbf{u} + \tau_p (\mathbf{g} - \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \quad [21]$$

με

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u}_c + \mathbf{u}_d \quad [22]$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση [15], παίρνουμε τη σχέση:

$$\nabla(c\mathbf{u}_c) = \nabla \cdot (D\nabla c) \quad [23]$$

Η εξίσωση [23] περιλαμβάνει τη μεταφορά, αδράνεια και διάχυση σε περιγραφή κατά Euler για τη συγκέντρωση της σωματιδιακής φάσης. Αδιαστατοποιώντας με τα χαρακτηριστικά μεγέθη της ροής (τη διάμετρο του αγωγού  $d_t$  για τα μήκη και τη μέση ταχύτητα  $u_o$  για τις ταχύτητες) προκύπτει η αδιάστατη μορφή της εξίσωσης [23] (σε ολοκληρωματική μορφή):

$$\int_S c \left[ \mathbf{u} + St \left( \frac{1}{Fr} \mathbf{g} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) \right] \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{Pe_s} \int_S \nabla c \cdot d\mathbf{S} \quad [24]$$

όπου  $St = t_p u_o / d_t$  ο αριθμός Stokes, με  $t_p$  το χρόνο χαλάρωσης,  $u_o$  τη μέση ταχύτητα του ρευστού στην είσοδο και  $d_t$  τη διάμετρο του αγωγού. Επίσης  $Fr = u_o^2 / g d_t$  ο αριθμός Froude και  $Pe = d_t u_o / D$  ο αριθμός Peclet, που εξαρτάται από τη διάμετρο του αγωγού. Τελικά, εκφράζοντας την εξίσωση [24] ως προς την αδιαστατοποιημένη ταχύτητα μεταφοράς  $\mathbf{u}_c$  προκύπτει η απλοποιημένη σχέση:

$$\int_S c \mathbf{u}_c \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{Pe_s} \int_S \nabla c \cdot d\mathbf{S} \quad [25]$$

η οποία έχει τη γνωστή μορφή της εξίσωσης μεταφοράς-διάχυσης και μπορεί να διακριτοποιηθεί ανάλογα. Χρησιμοποιείται (όπως και στο μοντέλο επίλυσης των Navier-Stokes) η μέθοδος deferred correction, όπως θα εξηγηθεί στο κεφάλαιο 3.



### 3 Αριθμητικά μοντέλα

Μετά την ανάλυση της φυσικής που διέπει το πρόβλημα που θα μας απασχολήσει καθώς και τη μαθηματική θεμελίωση του όπως βρίσκεται στη βιβλιογραφία, μπορούμε να προχωρήσουμε στην περιγραφή των αριθμητικών μοντέλων που χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση του. Στην παρούσα εργασία ασχοληθήκαμε με ολόκληρο το φάσμα της διαδικασίας αριθμητικής επίλυσης, ξεκινώντας από την κατασκευή της γεωμετρίας και πλεγματοποίησής της, συνεχίζοντας στην επίλυση της ροής και της συγκέντρωσης της σωματιδιακής φάσης και τέλος την ανάλυση των αποτελεσμάτων τα οποία όμως θα παρουσιαστούν στο επόμενο κεφάλαιο.

Στο παρόν κεφάλαιο, η διαδικασία επίλυσης χωρίστηκε στα εξής μέρη: *Κατασκευή Γεωμετρίας - Πλεγματοποίηση, Επίλυση Πεδίου Ροής Ρευστού, Επίλυση Πεδίου Συγκεντρώσεως Σωματιδίων, Μοντέλο Σύγκρισης Πεδίων Ροής*. Στο κάθε υποκεφάλαιο παρουσιάζονται οι μεθοδολογίες και τα αριθμητικά μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν και όπου κρίνεται απαραίτητο αναφέρονται και πρόσθετα στοιχεία βασικής θεωρίας.

#### 3.1 Κατασκευή Γεωμετρίας - Πλεγματοποίηση

Η λεπτομερής αναπαράσταση του πεδίου ταχυτήτων του αέρα στους αεραγωγούς της αναπνευστικής οδού είναι μεγάλης σημασίας για τη μελέτη φαινομένων που σχετίζονται με την εναπόθεση σωματιδίων. Η γεωμετρία των αγωγών αυτών, που είναι βασικός παράγοντας επίδρασης για το πεδίο ροής, είναι συνήθως αρκετά πολύπλοκη αφού περιλαμβάνει ανώμαλες επιφάνειες, διακλαδώσεις, καμπυλότητες και μεταβλητές διατομές, οπότε η αναπαράσταση τους με μαθηματικό τρόπο είναι δύσκολη έως αδύνατη ή βασίζεται σε στατιστικά μεγέθη από πραγματικές μετρήσεις σε πνεύμονες ασθενών που έχουν γίνει στο παρελθόν, δίνοντας όμως προσεγγιστικά και *απλοποιημένα μοντέλα γεωμετρίας*. Πάνω σε τέτοιες απλοποιημένες γεωμετρίες, η οποίες είναι ιδανικές για παραμετρικές μελέτες λόγω της ευκολίας αναπαραγωγής τους σε H/Y, έχει διεξαχθεί πλήθος μελετών που κατέληξαν σε σημαντικά συμπεράσματα σχετικά με τα φαινόμενα τόσο της ροής του ρευστού (δευτερεύουσες ροές, δίνες, οριακά στρώματα κτλ), όσο και της συμπεριφοράς της σωματιδιακής φάσης (σημεία μεγάλης εναπόθεσης ή *hot spots*, προφίλ συγκεντρώσεων κτλ).

Παρ'όλα αυτά, συχνά είναι αναγκαία η ακριβής περιγραφή της γεωμετρίας για να γίνει δυνατή η μελέτη «ασθενέστερων» φαινομένων που επηρεάζουν την εφαρμογή και «χάνονται» λόγω απλοποιημένης γεωμετρίας. Σε αυτό προστίθεται και η αναδυόμενη ανάγκη για

προσομοιώσεις ανά ασθενή (patient – specific cases), για παράδειγμα κατά τη διάγνωση ή θεραπεία ασθενειών, όπου, λόγω των ανατομικών διαφορών που παρουσιάζονται ανά άτομο, η χρήση απλοποιημένης γεωμετρίας δεν είναι αποδεκτή. Προς αυτή την κατεύθυνση έχουν γίνει βήματα τα τελευταία χρόνια, με την ταυτόχρονη ανάπτυξη των μεθόδων ιατρικής απεικόνισης (medical imaging), όπως είναι η *μαγνητική τομογραφία* (MRI), ώστε να μπορούμε να αναπαράγουμε υπολογιστικά την ακριβή γεωμετρία των αεραγωγών του αναπνευστικού συστήματος.

Για την κατασκευή των διακλαδώσεων που μελετήθηκαν στη συγκεκριμένη εργασία χρησιμοποιήθηκαν το εμπορικό πακέτο *Design Modeler* του *Ansys 11* καθώς και κώδικες σε *FORTRAN* που αναπτύχθηκαν στο εργαστήριο.

Μετά την κατασκευή της γεωμετρίας ακολουθεί η κατασκευή του *αριθμητικού πλέγματος*, δηλαδή η διαίρεση και αναπαράσταση του γεωμετρικού σχήματος με πεπερασμένο αριθμό υπολογιστικών χωρίων (στοιχεία, όγκοι ελέγχου κτλ), πάνω στα οποία θα διακριτοποιηθούν οι μαθηματικές εξισώσεις του προβλήματος και θα υπολογιστούν οι τιμές των μεταβλητών. Διακρίνουμε δύο βασικούς τύπους πλεγμάτων, τα *δομημένα* και τα *μη-δομημένα* πλέγματα. Η θεμελιώδης διαφορά ανάμεσα στους δύο αυτούς τύπους είναι ότι στα δομημένα πλέγματα οι *πλεγματικές γραμμές* (grid lines) δεν τέμνονται σε κανένα σημείο, με αποτέλεσμα ο κάθε κόμβος να γειτνιάζει με σταθερό αριθμό υπολογιστικών χωρίων ή κόμβων (4 σε 2-D πλέγματα, 6 σε 3-D πλέγματα), ενώ στα μη-δομημένα πλέγματα δεν υπάρχει τέτοιος περιορισμός.

Το πλεονέκτημα των δομημένων πλεγμάτων είναι ότι η δομή τους επιτρέπει την εύκολη και συστηματική αρίθμηση των πλεγματικών γραμμών και, λόγω της συνθήκης γειτνίασης, ο πίνακας του αλγεβρικού συστήματος που προκύπτει είναι κανονικού σχήματος (τριδιαγώνιος ή πολυδιαγώνιος), γεγονός που επιτρέπει τη χρήση ειδικών μεθόδων επίλυσης του με σχετική ευκολία. Επίσης, συγκριτικές μελέτες έχουν δείξει ότι για προβλήματα ροής ρευστού σε διακλαδώσεις, τα δομημένα πλέγματα δίνουν ακριβέστερες λύσεις για μικρότερο αριθμό υπολογιστικών χωρίων και μειώνουν το χρόνο επίλυσης μέχρι και κατά 3 φορές (*Longest & Vinchurkar, 2007*). Αυτό αποδίδεται στον ίδιο προσανατολισμό των υπολογιστικών χωρίων με την κύρια κατεύθυνση της ροής, γεγονός που μειώνει την αριθμητική διάχυση. Μειονεκτήματα των δομημένων πλεγμάτων είναι η δυσκολία εφαρμογής τους για πολύπλοκες γεωμετρίες καθώς και η δυσκολία ελέγχου της κατανομής των πλεγματικών γραμμών στα σημεία ενδιαφέροντος αφού, πυκνώνοντας για παράδειγμα το πλέγμα σε μια περιοχή αναγκαστικά πυκνώνει και σε άλλες περιοχές, αυξάνοντας το υπολογιστικό κόστος και επηρεάζοντας τη σύγκλιση.

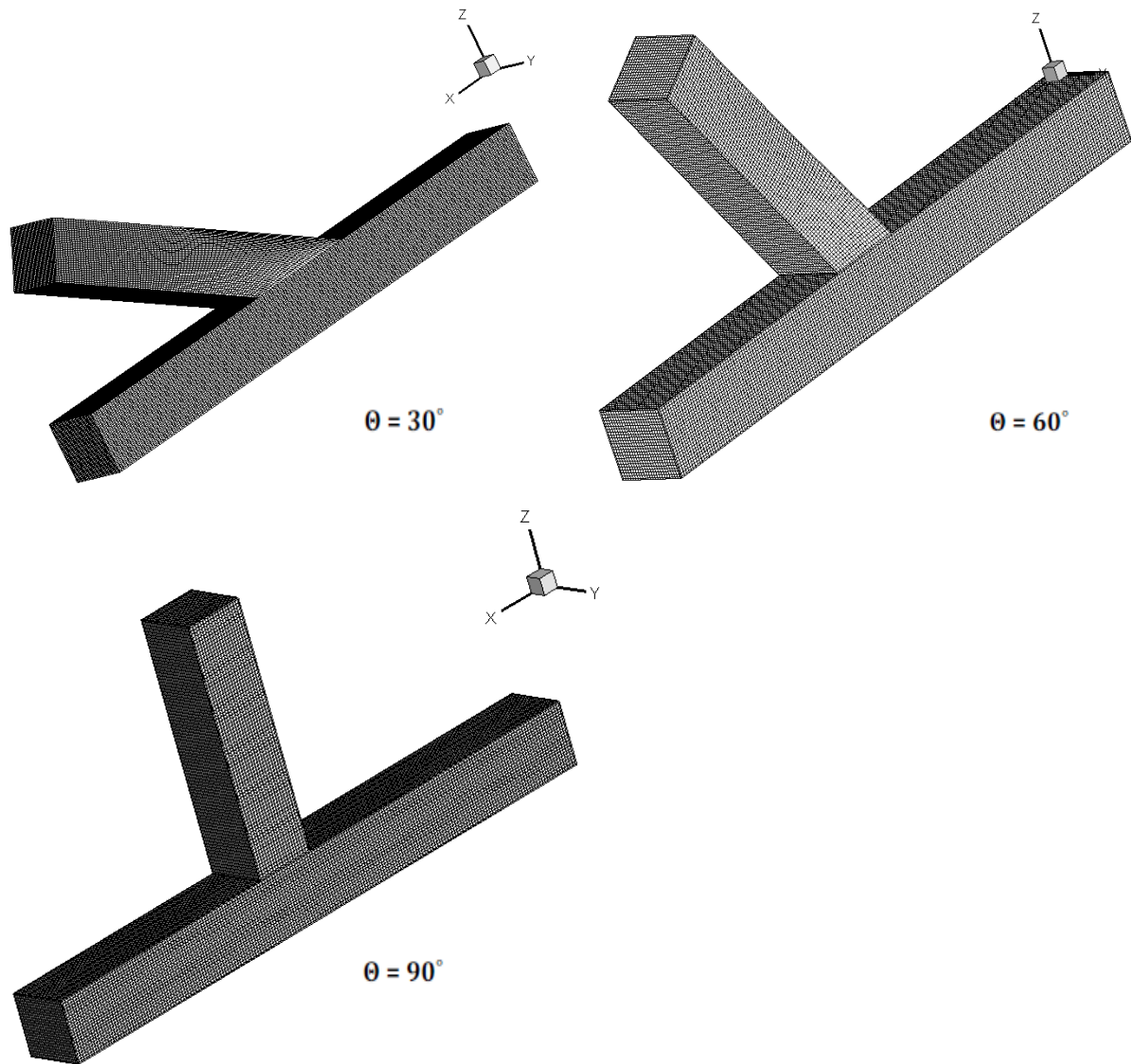


Από την άλλη πλευρά, τα μη-δομημένα πλέγματα μπορούν να εφαρμοσθούν αρκετά ευκολότερα σε πολύπλοκα γεωμετρικά σχήματα (βλ. Μέθοδο Προελαύνοντος Μετώπου κ.α.) και είναι αρκετά ευέλικτα όσο αναφορά τις πυκνώσεις και αραιώσεις σε περιοχές ενδιαφέροντος, την ορθογωνικότητα αλλά ακόμα και την ταυτόχρονη χρήση διαφορετικών τύπων υπολογιστικών χωρίων (τρίγωνα, πολύγωνα για 2-D, πυραμιδοειδή και πολύπλευρα για 3-D) ανάλογα με τις απαιτήσεις για απόδοση και ακρίβεια. Βασικό μειονέκτημά τους είναι η άναρχη δόμηση του πλέγματος που απαιτεί εξειδικευμένους τρόπους χειρισμού των κόμβων κατά την επίλυση αφού τα μητρώα του συστήματος δεν είναι πλέον κανονικής μορφής με αποτέλεσμα να αυξάνεται ο χρόνος επίλυσης. Επιπλέον, λόγω του τυχαίου προσανατολισμού των υπολογιστικών χωρίων αυξάνεται η αριθμητική διάχυση και απαιτείται μεγαλύτερος αριθμός τους σε σχέση με τα δομημένα πλέγματα ώστε να επιτευχθούν λύσεις ίδιας ακρίβειας.

Στην παρούσα εργασία θα χρησιμοποιηθούν αποκλειστικά δομημένα πλέγματα για την επίλυση των εξισώσεων ροής και σωματιδίων λόγω των πλεονεκτημάτων που αναφέρθηκαν παραπάνω. Το πλήθος των διαμερίσεων είναι κατάλληλο ώστε να επιτυγχάνεται ανεξαρτησία πλέγματος, μετά από δοκιμές.

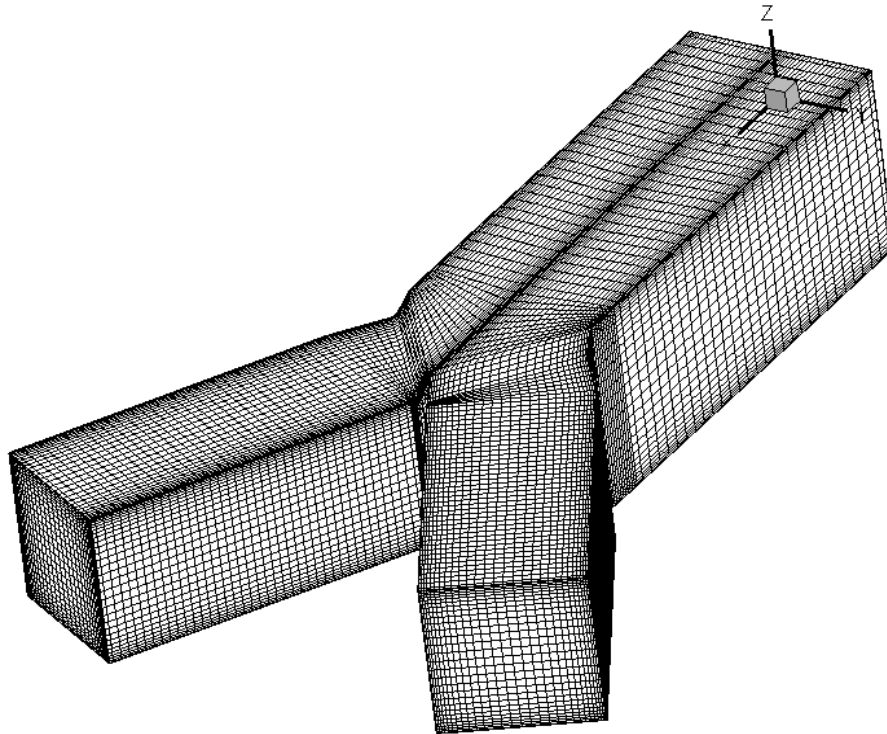
### **3.1.1 Διακλαδώσεις τετραγωνικής διατομής**

Χρησιμοποιώντας in-house κώδικα του εργαστηρίου (γραμμένο σε γλώσσα FORTRAN) κατασκευάστηκαν *ασύμμετρες διακλαδώσεις τετραγωνικής διατομής* (για 30, 60 και 90 μοίρες), από τις οποίες προέκυψε κατευθείαν και το δομημένο πλέγμα. Επιπλέον, με βάση τη δημοσίευση των Asgharian και Anjivei (1994), κατασκευάστηκε *συμμετρική διακλάδωση τετραγωνικής διατομής* γωνίας 60 μοιρών. Η τελευταία κατασκευάστηκε με τη βοήθεια των *Design Modeler* του *Ansys 11* και του προγράμματος γένεσης πλέγματος ανοιχτού λογισμικού *Pointwise*.



**Σχήμα 3.1** Πλέγματα ασύμμετρων διακλαδώσεων (30, 60 και 90 μοιρών αντίστοιχα)

Και για τις τέσσερις περιπτώσεις η ακμή της τετραγωνικής διατομής στην είσοδο είναι ίση με  $D = 0.56\text{cm}$ , αφού αναφερόμαστε στις γενιές G3 – G4 του απλοποιημένου μοντέλου για την αναπνευστική οδό του Weibel (1963). Για τις ασύμμετρες διακλαδώσεις του σχήματος [3.1] ισχύει επίσης ο λόγος 10:1 μεταξύ μήκους και ακμής. Περαιτέρω λεπτομέρειες για τις διαστάσεις δίνονται παρακάτω.



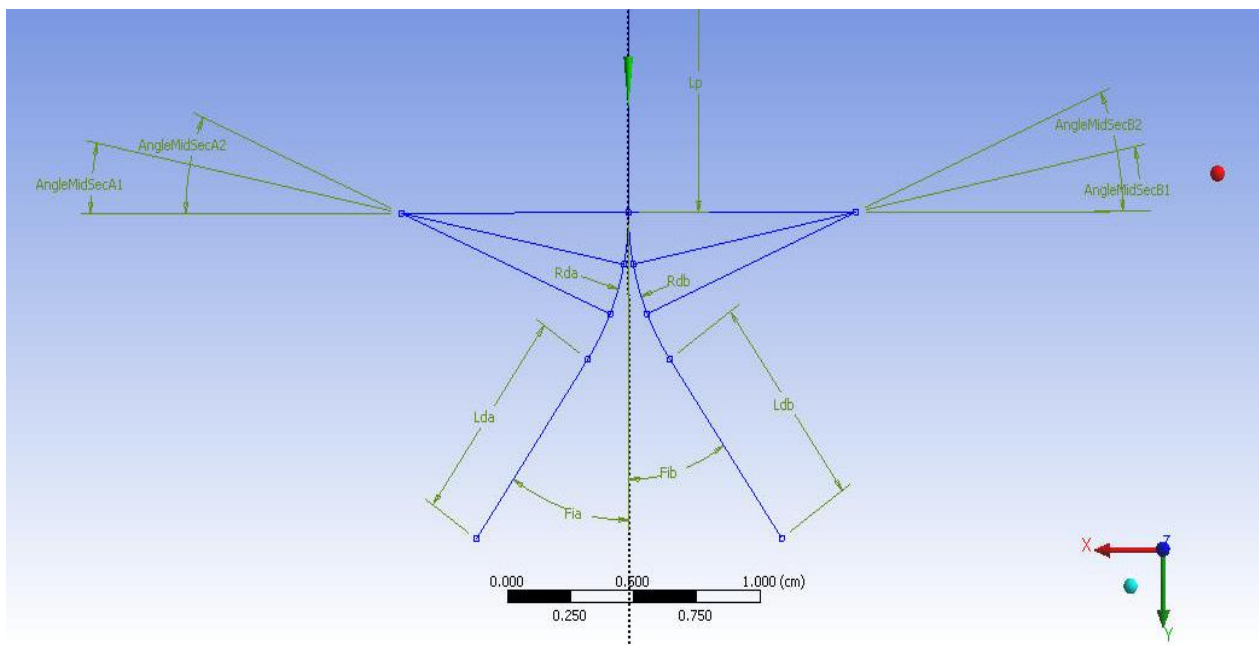
Σχήμα 3.2 Πλέγματα συμμετρικής διακλάδωσης 60 μοιρών (περίπου 200,000 κόμβοι)

### 3.1.2 Διακλαδώσεις κυκλικής διατομής (PRB model)

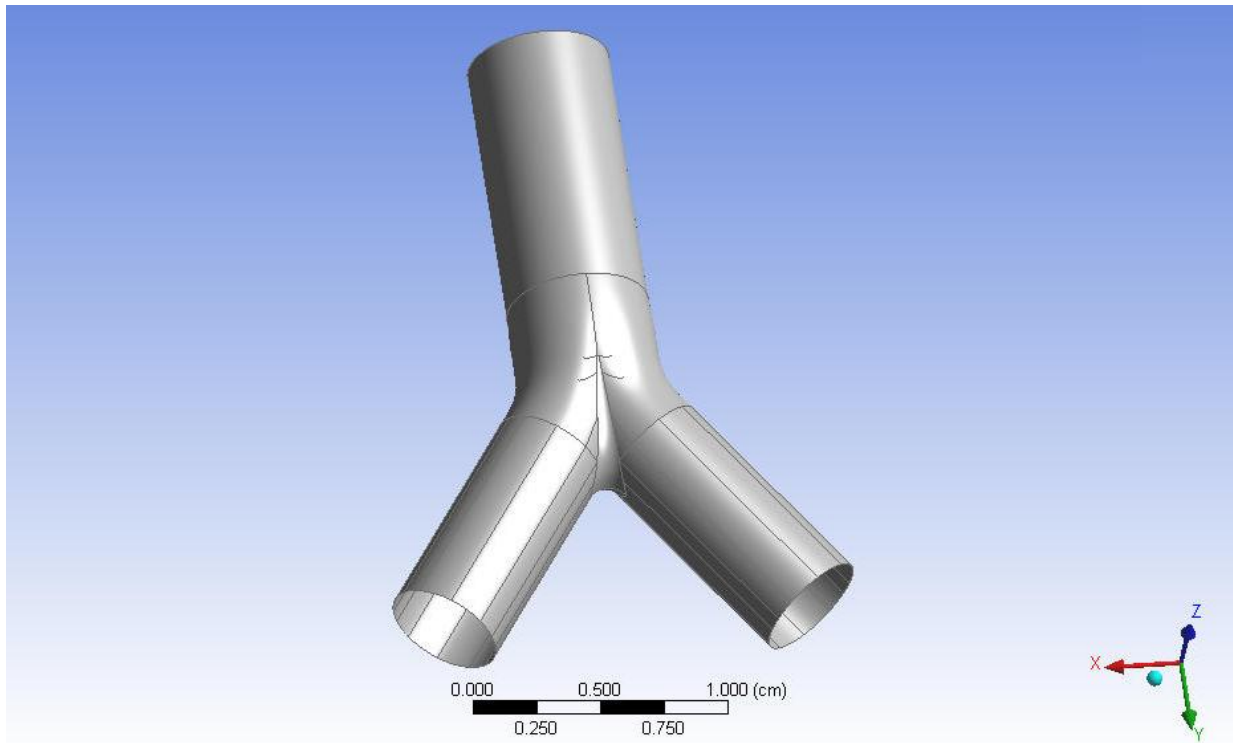
Για αυτή την περίπτωση χρησιμοποιήθηκε το γεωμετρικό μοντέλο *φυσιολογικά ρεαλιστικής διακλάδωσης (physiologically realistic bifurcation – PRB)* των Heistracher & Hofmann (1995) , με τις διαστάσεις των γενιών G3-G4 να είναι αντίστοιχες με αυτές που έχουν χρησιμοποιήσει στην εργασία τους οι Longest & Vinchurkar (2007) δηλαδή του μοντέλου του Weibel (1963). Για να πετύχουμε όσο το δυνατόν καλύτερη αναπαράσταση της γεωμετρίας (επιφάνειας) χρησιμοποιήσαμε το λογισμικό *Design Modeler* του *Ansys 11*. Για να κατασκευαστεί το καμπύλο *carinal ridge* χρησιμοποιήθηκαν οι εξισώσεις που δίνονται στην εργασία των Heistracher & Hofmann (1995) και πολυωνυμική παρεμβολή μεταξύ 6 σημείων. Οι κύριες διαστάσεις των διακλαδώσεων παραθέτονται στον πίνακα [3.1]:

Διακλάδωση	Πρώτη
Διάμετρος Γονέα (cm)	$D_1 = 0.56$
Διάμετρος θυγατρικής (cm)	$D_2 = 0.45$
Μήκος κλάδου (cm)	$L_1 = 1.1$
	$L_2 = 0.92$
Γωνία διακλάδωσης (μισή)	$\alpha_1 = 30^\circ$
Αριθμός Re κλάδου	$Re_1 = 1788$

**Πίνακας 3.1** Διαστάσεις και παράμετροι των διακλαδώσεων G3-G4



**Σχήμα 3.4** Κεντρικές γραμμές και γεωμετρικά χαρακτηριστικά της διακλάδωσης.



**Σχήμα 3.5** Επιφάνεια διακλάδωσης – φαίνεται η «στρογγυλεμένη» μορφή του carinal ridge.

Αφού έχουμε κατασκευάσει τη γεωμετρία, προχωρούμε στην κατασκευή του δομημένου πλέγματος. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, λόγω του πολύπλοκου σχήματος αυτό δεν είναι τόσο απλό.

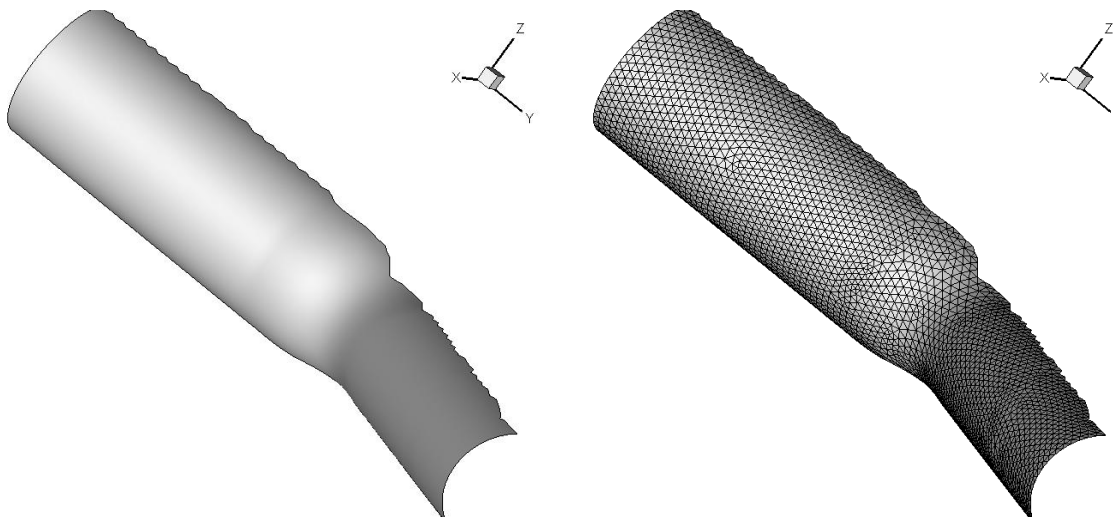
Όπως περιγράφεται και λεπτομερώς στις εργασίες των Makris et al (2010) και Makris et al (2011), με κώδικα που αναπτύχθηκε στο εργαστήριο μπορούμε να δημιουργήσουμε δομημένο multi-block πλέγμα τριών διαστάσεων για επιφάνειες αγγείων που αποκτώνται μέσω αξονικής τομογραφίας. Έχουν ήδη γίνει εφαρμογές της μεθόδου σε αορτικό ανεύρυσμα και διακλαδώσεις αρτηριών. Βασικό πλεονέκτημα της μεθόδου είναι η ικανότητα να διατηρήσει τις πολύπλοκες φυσικές επιφάνειες των αγγείων, με τη λογική της ανά ασθενή αντιμετώπισης στη διάγνωση και θεραπεία.

Στην περίπτωσή μας, έχουμε ήδη δημιουργήσει τη γεωμετρική επιφάνεια οπότε μπορούμε να προσπεράσουμε το στάδιο της επεξεργασίας της εικόνας από τομογραφία. Εξάγουμε την επιφάνεια στον τύπο αρχείου *STL* (κατά το οποίο η επιφάνεια χωρίζεται σε τριγωνικά στοιχεία), που χρησιμοποιείται ευρέως στα σχεδιαστικά προγράμματα στερεο-λιθογραφίας. Η μέθοδος, δεχόμενη ως είσοδο μια ανοιχτή (συνήθως κυρτή) επιφάνεια χωρίς

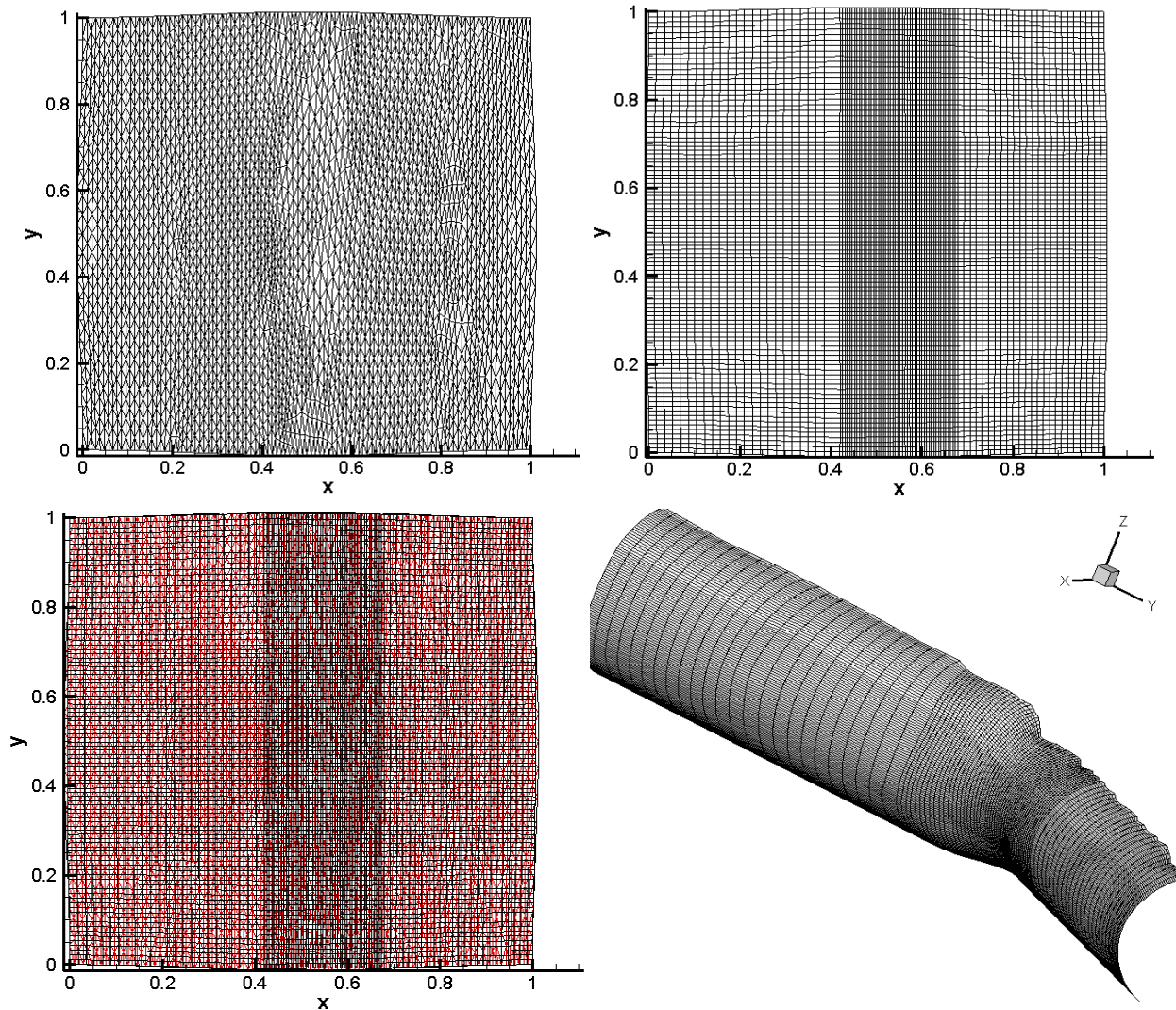
οπές σε μορφή STL, μπορεί να την αναπαράγει πιστά σε μια καινούργια επιφάνεια δομημένου πλέγματος. Αυτό συνοπτικά γίνεται με τα ακόλουθα βήματα:

- Μεταφορά της επιφάνειας τριγωνικών στοιχείων από το χώρο σε ένα 2-D επίπεδο μέσω ενός ισομορφικού μετασχηματισμού (αλγόριθμος *Floater*),
- Σχηματισμός του δομημένου 2-D πλέγματος (επιφάνεια τετραπλεύρων) πάνω στην τριγωνική επιφάνεια,
- Ταξινόμηση των κόμβων του δομημένου πλέγματος πάνω στα τρίγωνα,
- Υπολογισμός των βαρυκεντρικών συντεταγμένων των κόμβων του δομημένου πλέγματος ως προς το τρίγωνο στο οποίο ανήκουν,
- Αντίστροφος ισομορφικός μετασχηματισμός του 2-D δομημένου πλέγματος στο χώρο, διατηρώντας τις βαρυκεντρικές συντεταγμένες.

Παράδειγμα της μεθόδου φαίνεται παρακάτω, όπου μια μη-δομημένη πλεγματική επιφάνεια στο χώρο αποτελούμενη από τρίγωνα μετατρέπεται σε επιφάνεια τετραπλεύρων δομημένου πλέγματος.



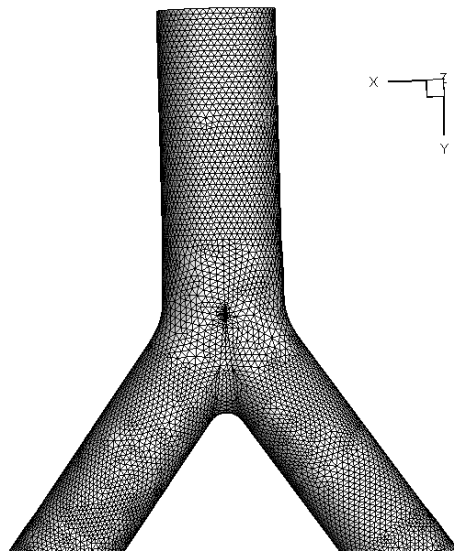
**Σχήμα 3.6α** Γένεση δομημένου πλέγματος



Σχήμα 3.6β Γένεση δομημένου πλέγματος

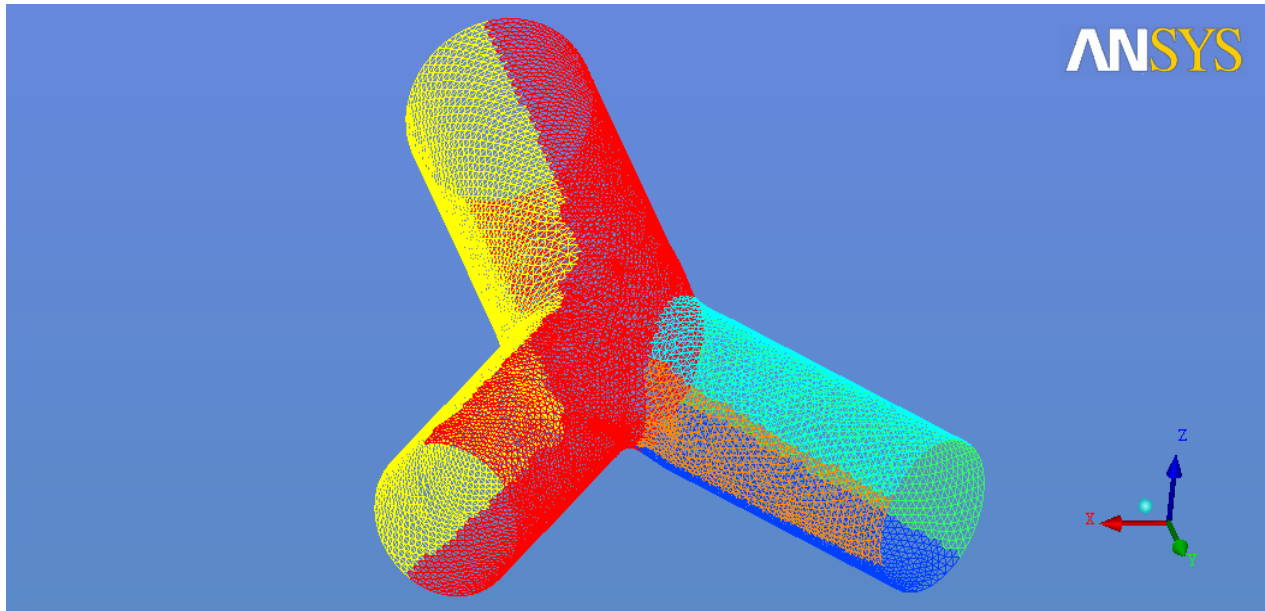
Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η μέθοδος μετασχηματισμού του πλέγματος από μη-δομημένο σε δομημένο λειτουργεί για ανοιχτές επιφάνειες χωρίς οπές. Όπως φαίνεται και από τα σχήματα των διακλαδώσεων παραπάνω, οι επιφάνειες που εξετάζουμε είναι κλειστές. Για αυτό το λόγο χρειάστηκε να διαιρέσουμε την επιφάνεια σε επιμέρους κομμάτια και να εφαρμόσουμε την παραπάνω μεθοδολογία σε καθένα ξεχωριστά. Η ακριβής τοπολογία που επιλέχθηκε καθώς και η διαδικασία που ακολουθήθηκε περιγράφεται αναλυτικά στην εργασία των Makris et al (2011) και φαίνεται και στα παρακάτω σχήματα. Η αρχική μονή διακλάδωση διαιρέθηκε ως εξής: αποκοπή του ενός θυγατρικού κλάδου (έστω B) στο σημείο του διαχωρισμού του κεντρικού αγωγού και διαίρεσή της σε τέσσερις επιφάνειες (σχήμα [3.8]). Οι εναπομείναντες αγωγοί (ο γονεϊκός και ο ένας θυγατρικός, έστω A)

διαιρέθηκαν σε δύο επιφάνειες, με μια τομή κατά μήκος. Στο κομμάτι που έρχεται σε επαφή με τον αποκομμένο θυγατρικό Β παρουσιάζεται μια οπή, η οποία συμπληρώνεται με τριγωνική επιφάνεια. Στη συνέχεια, για όλες τις παραπάνω επιφάνειες, που είναι πλέον ανοιχτές χωρίς οπές, αναπαράγουμε με τη μεθοδολογία που αναπτύχθηκε τα δομημένα επιφανειακά πλέγματα. Τέλος, ενώνουμε τις επιφάνειες (σχήμα [3.9]) καταλήγοντας στην αρχική επιφάνεια με δομημένο πλέον πλέγμα, και μπορούμε εύκολα να κατασκευάσουμε το εσωτερικό τρισδιάστατο πλέγμα. Ακολουθούν κάποιες βελτιώσεις (με αλγορίθμους Laplace και Steger-Sorenson) και διορθώσεις σε όποια «δύσκολα» σημεία κρίνεται αναγκαίο, καταλήγοντας τελικά στο τρισδιάστατο δομημένο πλέγμα δύο block της μονής διακλάδωσης (βλ. σχήμα [3.10] – φαίνονται μόνο οι εξωτερικές επιφάνειες για ευκολία). Για την προ και μετά επεξεργασία των επιφανειών χρησιμοποιήθηκαν τα προγράμματα *ICEM MESHER* του *ANSYS 11* και το *POINTWISE*.

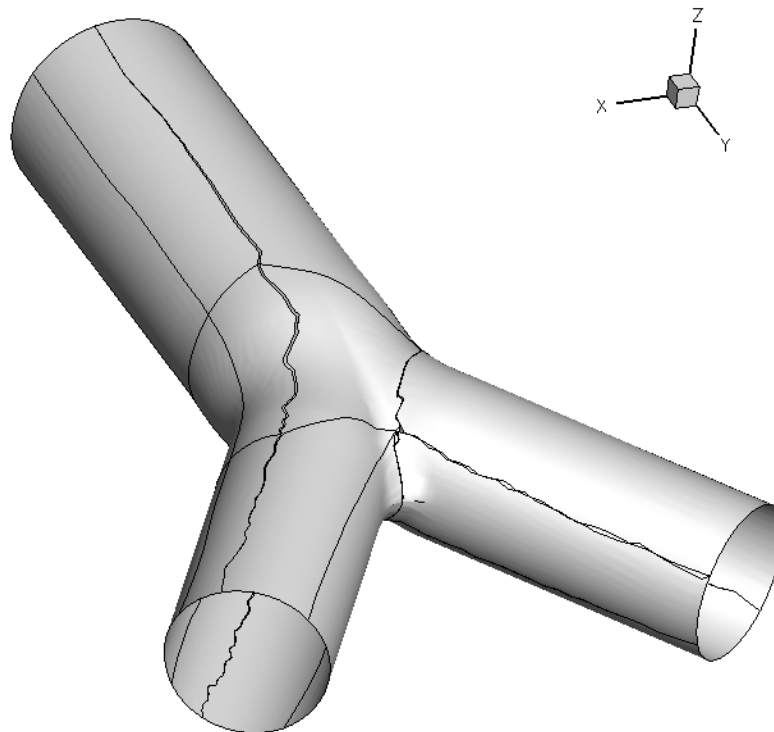


**Σχήμα 3.7** Μετατροπή σε επιφανειακό αρχείο STL (τριγωνικά στοιχεία).

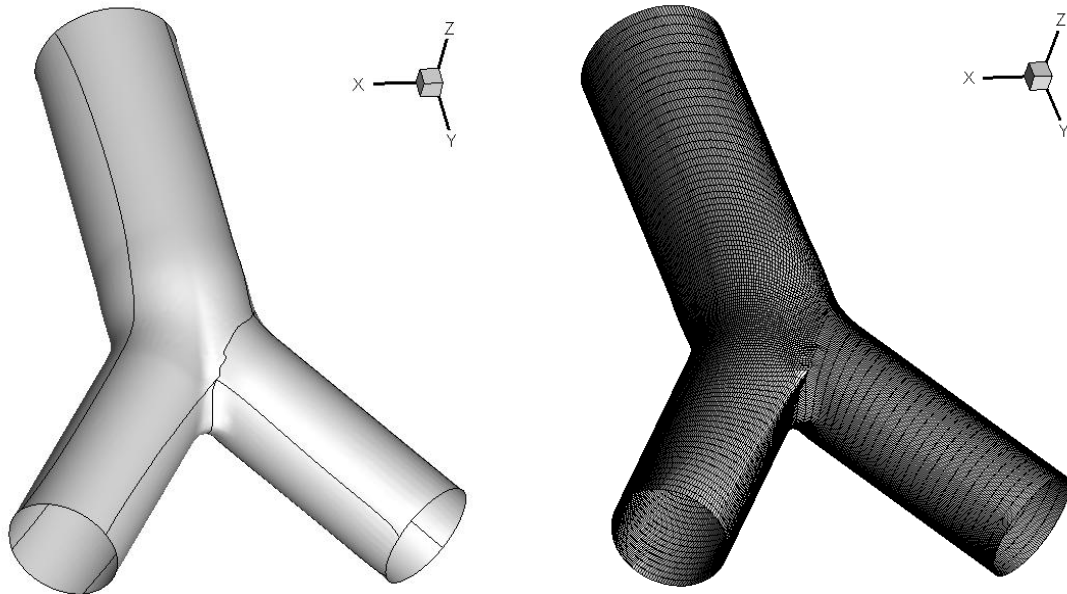




**Σχήμα 3.8** Διαίρεση της επιφάνειας σε κομμάτια ώστε να γίνει η μετατροπή σε δομημένο πλέγμα (ICEM MESHER– ANSYS).



**Σχήμα 3.9** Σύνθεση των επιφανειακών δομημένων πλεγμάτων – φαίνονται τα διάφορα blocks.



**Σχήμα 3.10** Δομημένα πλέγματα διακλάδωσης

Αναφέρουμε ότι για να επιτύχουμε ανεξαρτησία πλέγματος για τη διακλάδωση χρειάστηκαν περίπου 900,000 κόμβοι.

Αφού έχουμε έτοιμα τα πλέγματα μπορούμε να προχωρήσουμε στην επίλυση της ροής του αέρα.

## 3.2 Επίλυση πεδίου ροής

Για να προχωρήσουμε στην προσομοίωση της σωματιδιακής κατάστασης χρειαζόμαστε το πεδίο ταχυτήτων του ρευστού στις τρεις διαστάσεις. Αυτό επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας τον κώδικα του εργαστηρίου, γραμμένο σε FORTRAN, τη μεθοδολογία του οποίου θα περιγράψουμε εδώ επιγραμματικά. Για περισσότερες λεπτομέρειες ο αναγνώστης παραπέμπεται στις εργασίες των Neofytou (2005) και Neofytou et al (2008).

### 3.2.1 Επιλυόμενες εξισώσεις και αριθμητικά σχήματα

Η ροή στις περιπτώσεις που εξετάζουμε κυμαίνεται από  $Re=100$  μέχρι  $Re=1788$ , και όπως έχει δειχθεί σε αρκετές μελέτες, μπορεί να θεωρηθεί στρωτή και ασυμπίεστη. Αν και όπως είναι γνωστό η αναπνοή γίνεται ανά κύκλους (εισπνοή-εκπνοή), θα θεωρήσουμε μόνο την περίπτωση της εισπνοής, και επιπλέον μόνιμης ροής. Χρησιμοποιείται ο κώδικας των Neofytou & Tsangaris (2006), ο οποίος λύνει επαναληπτικά το σύστημα των εξισώσεων διατήρησης μάζας και Navier-Stokes σε ολοκληρωματική μορφή στις τρεις διαστάσεις. Οι αδιαστατοποιημένες εξισώσεις (παραλείπεται ο αστερίσκος) είναι οι εξής:

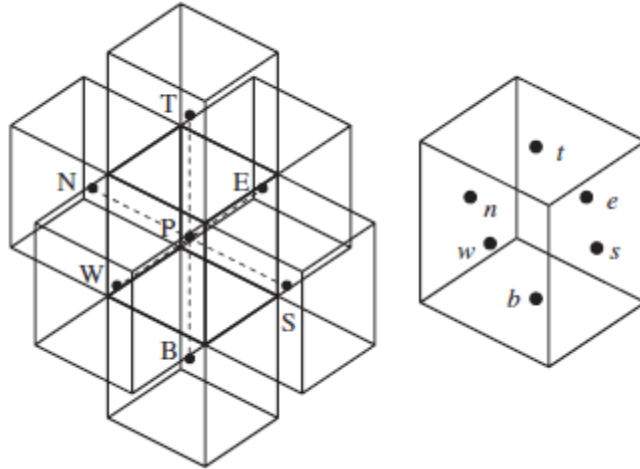
$$\text{Διατήρηση μάζας : } \int_S \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = 0$$

$$\text{Ορμή κατά x : } \int_S u\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = -\int_S p\mathbf{i}_x \cdot d\mathbf{S} + \frac{1}{\rho U_\infty D} \int_S \mu \left( \nabla u + \frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{i}_x + \frac{\partial v}{\partial x} \mathbf{i}_y + \frac{\partial w}{\partial x} \mathbf{i}_z \right) d\mathbf{S}$$

$$\text{Ορμή κατά y : } \int_S v\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = -\int_S p\mathbf{i}_y \cdot d\mathbf{S} + \frac{1}{\rho U_\infty D} \int_S \mu \left( \nabla v + \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{i}_x + \frac{\partial v}{\partial y} \mathbf{i}_y + \frac{\partial w}{\partial y} \mathbf{i}_z \right) d\mathbf{S}$$

$$\text{Ορμή κατά z : } \int_S w\mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = -\int_S p\mathbf{i}_z \cdot d\mathbf{S} + \frac{1}{\rho U_\infty D} \int_S \mu \left( \nabla w + \frac{\partial u}{\partial z} \mathbf{i}_x + \frac{\partial v}{\partial z} \mathbf{i}_y + \frac{\partial w}{\partial z} \mathbf{i}_z \right) d\mathbf{S}$$

όπου  $U_\infty$  η χαρακτηριστική ταχύτητα με την οποία και αδιαστατοποιούμε (στην περίπτωση μας είναι η μέση ταχύτητα στην είσοδο του αγωγού) και  $D$  η υδραυλική διάμετρος του αγωγού (δηλαδή η πραγματική διάμετρος για κυκλική διατομή και η ακμή για τετραγωνική διατομή). Για να επιλυθούν οι εξισώσεις χρησιμοποιούνται οι αλγόριθμος SIMPLE (Patankar & Spalding, 1972) σε συνδυασμό με το σχήμα QUICK (Leonard, 1979) όπως περιγράφεται αμέσως παρακάτω. Το υπολογιστικό χωρίο φαίνεται στο σχήμα [3.11]:



**Σχήμα 3.11** Σημεία υπολογισμού των μεταβλητών και υπολογιστικός όγκος πλέγματος.

Τα επιφανειακά ολοκληρώματα των παραπάνω εξισώσεων μπορούν να αναπτυχθούν στα επιφανειακά ολοκληρώματα πάνω στις έξι πλευρές του υπολογιστικού όγκου CV. Ο κεντρικός υπολογιστικός κόμβος είναι ο P και θα αναφερθούμε μόνο στην ανατολική επιφάνεια e (east) αφού τα ίδια ισχύουν αντιστοίχως για όλες τις πλευρές του εξαπλεύρου. Ο δείκτης m υποδηλώνει την επανάληψη στην οποία γίνονται οι υπολογισμοί (implicit terms).

Διακριτοποιώντας την εξίσωση διατήρησης μάζας παίρνουμε:

$$\int_S \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = \dot{m}_e^m \approx u_e^{m-1} S_e \quad [26]$$

όπου  $S_e$  η επιφάνεια και  $u_e^{m-1}$  μπορεί να υπολογιστεί παρεμβάλλοντας γραμμικά μεταξύ των όρων  $u_P^{m-1}$  και  $u_E^{m-1}$ . Έτσι, υπολογίζουμε και τον όρο μεταφοράς της εξίσωσης ορμής:

$$\int_S u \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} \approx \dot{m}_e^m u_e^m \quad [27]$$

Ο όρος  $u_e^m$  υπολογίζεται με το σχήμα QUICK (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics), το οποίο παρέχει ακρίβεια 3<sup>ης</sup> τάξης (ανώτερης των απλού UDS και CDS) αλλά κυρίως απαλλάσει από το πρόβλημα της «τεχνητής διάχυσης» που προκύπτει από τη χρήση των upwind σχημάτων χαμηλότερης τάξης. Αναπτύσσεται ως εξής:

$$u^{QUICK} = \begin{cases} u_P + C_1^+ (u_P - u_{W'})^{m-1} + C_2^+ (u_E - u_P)^{m-1} + du_e, & \text{if } \dot{m}_e > 0 \\ u_P + C_1^- (u_E - u_{EE'})^{m-1} + C_2^- (u_P - u_E)^{m-1} + du_e, & \text{if } \dot{m}_e < 0 \end{cases} \quad [28]$$

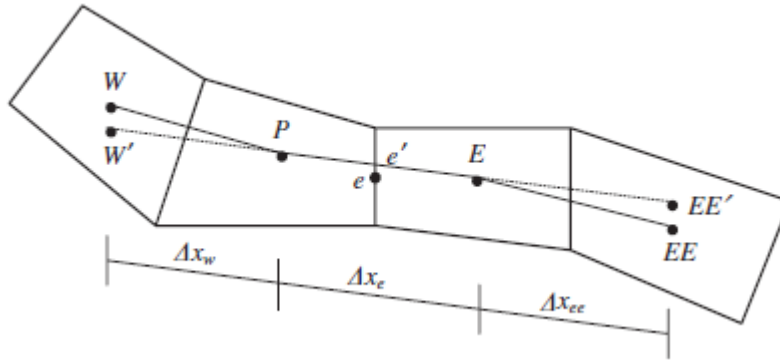
$$\text{με} \quad du_e = \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_e^{m-1} (x_e - x_{e'}) + \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)_e^{m-1} (y_e - y_{e'}) + \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_e^{m-1} (z_e - z_{e'}) \quad [29]$$

και τις σταθερές C να εξαρτώνται από το πλέγμα, οπότε:

$$C_1^+ = \frac{\Delta x_e^2}{4(\Delta x_w + \Delta x_e)\Delta x_w} \quad C_1^- = \frac{\Delta x_e^2}{4(\Delta x_e + \Delta x_{ee})\Delta x_{ee}}$$

$$C_2^+ = \frac{2\Delta x_w + \Delta x_e}{4(\Delta x_w + \Delta x_e)} \quad C_2^- = \frac{2\Delta x_{ee} + \Delta x_e}{4(\Delta x_e + \Delta x_{ee})} \quad [30]$$

για την τοπολογία που φαίνεται στο παρακάτω σχήμα:



**Σχήμα 3.12** Τοπολογία πλέγματος για το σχήμα QUICK.

Τελικά, από τη σχέση [27], ο όρος μεταφοράς γίνεται:

$$\int_S \rho u \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} \approx \rho \dot{m}_e^m u_e^{QUICK} \quad [31]$$

Οι όροι  $m-1$  αντιμετωπίζονται ως όροι πηγής. Για τους όρους της διάχυσης του δεξιού μέλους των εξισώσεων ορμής χωρίζουμε ως εξής:

$$\int_{S_e} \mu \left( \nabla u + \frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{i}_x + \frac{\partial v}{\partial x} \mathbf{i}_y + \frac{\partial w}{\partial x} \mathbf{i}_z \right) \mathbf{dS} = \underbrace{\int_{S_e} \mu \frac{\partial u}{\partial n} dS}_A + \underbrace{\int_{S_e} \mu \left[ \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y}, \frac{\partial w}{\partial z} \right] \cdot \mathbf{n} dS}_B \quad [32]$$

όπου  $\mathbf{n}$  το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια  $dS$ . Θεωρώντας προσεγγιστικά ότι  $\partial u / \partial n \approx \partial u / \partial \xi$  με  $\xi$  παράλληλο του PE διακριτοποιούμε:

$$\underbrace{\int_{S_e} \mu \frac{\partial u}{\partial \xi} dS}_{A'} \approx \mu_e \frac{u_e - u_p}{PE} S_e \quad [33]$$

Το εισαγόμενο σφάλμα διορθώνεται με μέθοδο *deffered correction*, δηλαδή εκφράζοντας τον όρο διάχυσης ως:

$$A'^m + (A + B - A')^{m-1} \quad [34]$$

Από τη σχέση [34] φαίνεται ότι, ενώ χρησιμοποιούμε για τους υπολογισμούς στην επανάληψη  $m$  τον «εύκολο» όρο  $A'^m$ , όταν επιτευχθεί σύγκλιση οι όροι  $A'^m$  και  $A'^{m-1}$  αναιρούνται, αφήνοντας μόνο τον αρχικό όρο διάχυσης χωρίς το προσεγγιστικό σφάλμα.

Η πίεση, έστω μόνο για την κατά- $x$  εξίσωση ορμής, διακριτοποιείται ως εξής:

$$-\int_S p \mathbf{i}_x \cdot \mathbf{dS} \approx - \left( p_e S_e^x - p_w S_w^x - p_n S_n^x - p_s S_s^x - p_t S_t^x - p_b S_b^x \right)^{m-1} \quad [35]$$

Τελικά, αντικαθιστώντας τις διακριτοποιήσεις στις αρχικές εξισώσεις ορμής κατά- $x$  παίρνουμε σύστημα της μορφής:

$$A_p^x u_p + \sum_i A_i^x u_i = Q_p^x \quad i=T,B,E,W,N,S \quad [36]$$

όπου  $A_i$  οι συντελεστές των αγνώστων και  $Q_p$  οι όροι πηγής, δηλαδή όλοι οι γνωστοί όροι που προέκυψαν κατά τη διακριτοποίηση. Αντίστοιχα προκύπτουν τα συστήματα και για τις κατευθύνσεις κατά  $y$  και  $z$ .

Στη συνέχεια, για να υπολογίσουμε τα πεδία ταχύτητας και πίεσης ακολουθούμε τον αλγόριθμο SIMPLE. Αρχικά, θεωρούνται τυχαίες αρχικές τιμές ταχύτητας  $(u^{m-1}, v^{m-1}, w^{m-1})$  και πίεσης  $(p^{m-1})$  ώστε να ξεκινήσει η επίλυση. Από αυτές τις τιμές υπολογίζονται οι καινούργιες ταχύτητες  $(u^*, v^*, w^*)$  επιλύοντας της εξισώσεις ορμής. Αυτές εν γένει δεν ικανοποιούν την εξίσωση διατήρησης μάζας άρα πρέπει να διορθωθούν ως εξής:

$$u^m = u^* + u', \quad v^m = v^* + v', \quad w^m = w^* + w' \quad [37]$$

και αυτό γίνεται διορθώνοντας το πεδίο πίεσης:  $p^m = p^{m-1} + p' \quad [38]$

Για να υπολογίσουμε την απαιτούμενη διόρθωση πίεσης σκεφτόμαστε ως εξής: είναι φανερό ότι το πεδίο ταχύτητας  $(u^m, v^m, w^m)$  πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση διατήρησης μάζας, από την οποία παίρνουμε με αντικατάσταση (για την επιφάνεια 'e'):

$$\dot{m}_e = u_e^m S_e = (u_e^* + u_e') S_e \quad [39]$$

και αντίστοιχα για όλες τις επιφάνειες του όγκου ελέγχου:

$$\sum_c \dot{m}_c = \Delta \dot{m}^* + \Delta \dot{m}' = 0, \quad c = t, b, e, w, n, s \quad [40]$$

Θέλοντας σε αυτό το σημείο να αντικαταστήσουμε τον άγνωστο όρο  $\Delta \dot{m}'$ , επιστρέφουμε στις εξισώσεις ορμής. Αν αντικαταστήσουμε σε αυτές τις  $u^*$  και  $u^m$  αντίστοιχα και αφαιρέσουμε κατά μέλη προκύπτει η έκφραση:

$$u_e' = \tilde{u}_e - C_e (p_e' - p_p') S_e \quad [41]$$

όπου  $\tilde{u}_e$  δεν είναι γνωστό ακόμα και  $C_e$  σταθερός συντελεστής που εξαρτάται από τη γεωμετρία. Αν χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση [41] για να εκφράσουμε τον όρο  $\Delta \dot{m}'$ , η εξίσωση διατήρησης της μάζας γίνεται πλέον:

$$A_p p_p' + \sum_i A_i p_i' = -\Delta \dot{m}^* - \Delta \tilde{\dot{m}} \quad i=T, B, E, W, N, S \quad [42]$$

στην οποία και αμελούμε τον άγνωστο όρο  $\Delta \tilde{\dot{m}}$ . Μπορούμε πλέον να λύσουμε το σύστημα [42] και να βρούμε τις διορθώσεις πίεσης για κάθε κόμβο του πλέγματος. Με τη διόρθωση γνωστή υπολογίζουμε το καινούργιο πεδίο ταχυτήτων, το οποίο πλέον θα ικανοποιεί τις

εξισώσεις συνέχειας, όχι όμως και τις εξισώσεις ορμής. Γι' αυτό, λύνουμε εκ νέου τις εξισώσεις ορμής έχοντας ως αρχικές τιμές τις διορθωμένες ταχύτητες και πιέσεις, και η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι την απαιτούμενη σύγκλιση. Ένα τελευταίο αλλά σημαντικό σχόλιο είναι ότι, λόγω της παράλειψης του όρου  $\Delta \tilde{m}$ , χρειάζεται να χρησιμοποιήσουμε υποχαλάρωση για να συγκλίνει η μέθοδος, τόσο για τις ταχύτητες όσο και για την πίεση.

Τα συστήματα των εξισώσεων λύνονται με τον επαναληπτικό αλγόριθμο SIP (Strong Implicit Procedure).

### 3.3 Σύγκριση πεδίων ροής

Ένα από τα σκέλη της παρούσης εργασίας ήταν και η σύγκριση των πεδίων ροής μεταξύ του μοντέλου ροής που παρουσιάστηκε και του εμπορικού πακέτου ANSYS CFX, για τις περιπτώσεις με τις οποίες ασχοληθήκαμε. Για αυτό το λόγο συντάχθηκε πρόγραμμα σε γλώσσα FORTRAN, το οποίο σύγκρινε κόμβο προς κόμβο τις τιμές των συνιστωσών των ταχυτήτων και της πίεσης για ορισμένο αριθμό κόμβο και στη συνέχεια υπολόγιζε το δείκτη *erms* ή *root mean square error*, που είναι η τετραγωνική ρίζα της μέσης τιμής του τετραγώνου της διαφοράς των πεδίων ταχυτήτων και πιέσεων. Ο μαθηματικός τύπος είναι ο εξής:

$$erms = \sqrt{\frac{\sum_N (\varphi_{ANSYS} - \varphi_{FORTRAN})^2}{N}} \quad [43]$$

όπου  $\varphi_{ANSYS}$  και  $\varphi_{FORTRAN}$  είναι οι συνιστώσες ταχύτητας και η πίεση για το κάθε πρόγραμμα αντίστοιχα και N ο αριθμός των κόμβων που επιλέχθηκαν. Στον παρακάτω πίνακα δίνονται ενδεικτικά μερικές τιμές του *erms* για διάφορες περιπτώσεις, από όπου τελικά συμπεραίνουμε ότι η διαφορά μεταξύ των δύο πεδίων δεν είναι σημαντική. Για αυτό το λόγο επιλέχθηκε να χρησιμοποιηθεί το εμπορικό πακέτο ANSYS CFX για την επίλυση των πεδίων ροής, χάρην ευκολίας γραφικού περιβάλλοντος αλλά κυρίως μικρότερων υπολογιστικών χρόνων.

Inlet Conditions	Pressure Difference (%)	Velocity Difference(%)
Re = 100 - uniform	0.68	4.89
Re = 100 - parabolic	0.57	5.19
Re = 1000 - uniform	0.92	23.26
Re = 1000 - parabolic	0.29	13.21
Re = 1788 - parabolic	2.03	17.28

**Πίνακας 3.2** Διαφορές μεταξύ των πεδίων ροής για διάφορες παραμέτρους ροής



### 3.4 Επίλυση πεδίου συγκεντρώσεως σωματιδίων

Έχοντας αποκτήσει το πεδίο ταχυτήτων και πιέσεων του ρευστού, προχωράμε στην επίλυση της συγκέντρωσης των σωματιδίων, αφού όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενο κεφάλαιο, θεωρούμε ότι μόνο το ρευστό επηρεάζει τα σωματίδια και όχι το αντίστροφο (one-way coupled). Το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε Piloni et al (2011) ακολουθεί Eulerian προσέγγιση, κατά την οποία επιλύεται μια τροποποιημένη εξίσωση μεταφοράς και διάχυσης, στην οποία ενσωματώνονται οι μηχανισμοί της αδράνειας, βαρυτικής έλξης και διάχυσης κατά τη μεταφορά των σωματιδίων.

Πριν την πιο λεπτομερή περιγραφή του μοντέλου που ακολουθεί αμέσως μετά, αξίζει να αναφερθούν οι διαφορές μεταξύ της προσέγγισης κατά Euler που χρησιμοποιείται εδώ με την προσέγγιση κατά Lagrange. Όπως είναι γνωστό, στην Eulerian προσέγγιση επιλύονται οι εξισώσεις μεταφοράς και διάχυσης της σωματιδιακής φάσης που διέρχεται μέσα από ένα ορισμένο όγκο ελέγχου στο χώρο και χρόνο. Εναλλακτικά, στην Lagrangian προσέγγιση επιλύονται οι ίδιες οι εξισώσεις κίνησης του σωματιδίου και βρίσκεται η τροχιά του. Βασικό πλεονέκτημα της Lagrangian μεθόδου είναι ο άμεσος χειρισμός της αδράνειας του σωματιδίου και διαφόρων φαινομένων όπως η σύγκρουση σωματιδίων, αναπηδήσεις στο τοίχωμα και λουπά. Μειονεκτήματα είναι η δυσκολία να εκφραστούν μέσω αυτής της μεθόδου τα φαινόμενα διάχυσης, διάφορα μέσα μεγέθη πεδίου (όπως είναι π.χ. η συγκέντρωση σωματιδίων στο χώρο) καθώς και η ανάγκη επίλυσης των τροχιών μεγάλου αριθμού σωματιδίων ώστε να προκύψει ικανοποιητική λύση. Από την άλλη, στην Eulerian προσέγγιση είναι πολύ εύκολο να εκφραστούν μεγέθη πεδίου, η συγκέντρωση λόγου χάρη στο μοντέλο μας υπολογίζεται άμεσα, αλλά είναι δύσκολος ο χειρισμός της αδράνειας, ιδιαίτερα για σωματίδια διαμέτρου  $>1\mu\text{m}$ , τα οποία και εξετάζουμε. Οι αιτίες της δυσκολίας αυτής θα φανούν παρακάτω. Άλλα σημαντικά πλεονεκτήματα της Eulerian μεθόδου είναι η αποσύμπλεξη των εξισώσεων μάζας και ορμής, η δυνατότητα να προσομοιωθούν σωματίδια αρκετά μικρής διαμέτρου (εφαρμογή που «δυσκολεύει» τις Lagrangian μεθόδους) καθώς και η ταυτόχρονη επίλυση για τη διάχυση και την αδράνεια.

Με μια αναδρομή στη βιβλιογραφία είναι φανερό ότι, λόγω των πλεονεκτημάτων που παρέχουν, έχουν χρησιμοποιηθεί κατά κόρον οι Lagrangian μέθοδοι για σωματίδια μεγάλου μεγέθους. Έχουν εφαρμοσθεί επίσης υβριδικές μέθοδοι (Euler-Lagrange) που χρησιμοποιούν πλεονεκτήματα και των δύο προσεγγίσεων. Τελευταία αρχίζουν να εμφανίζονται εργασίες που κάνουν χρήση της Euler προσέγγισης, και μια από αυτές είναι και η παρούσα.

### 3.4.1 Επιλυόμενες εξισώσεις και αριθμητικά σχήματα

Όπως περιγράφεται στο κεφάλαιο 2, καταλήξαμε στην αδιάστατη εξίσωση ισορροπίας πληθυσμού για μονοδιάσπαρτη σωματιδιακή φάση, συμπεριλαμβανομένων των μηχανισμών μεταφοράς, αδράνειας, βαρύτητας και διάχυσης, ως προς την ταχύτητα μεταφοράς των σωματιδίων  $\mathbf{u}_c$  :

$$\int_S c \mathbf{u}_c \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{Pe} \int_S \nabla c \cdot d\mathbf{S} \quad [44]$$

Ορίζονται οι ροές μάζας λόγω μεταφοράς, αδράνειας και βαρύτητας:

$$J_l^c = \int_S c \mathbf{u}_c \cdot d\mathbf{S} \quad [45]$$

και λόγω διάχυσης:

$$J_l^d = \frac{1}{Pe} \int_{S_l} \nabla c \cdot d\mathbf{S} \quad [46]$$

στις επιφάνειες  $l = t, b, e, w, n, s$  του όγκου ελέγχου.

Εισάγοντας το κάθετο διάνυσμα  $\mathbf{n}$  για τις επιφάνειες του όγκου ελέγχου και πηγαίνοντας όλους τους όρους στο πρώτο μέλος παίρνουμε:

$$\sum_l J_l = 0, \quad l = t, b, e, w, n, s \quad [47]$$

όπου  $J_l = J_l^c - J_l^d$  οι όροι για τη μεταφορά-αδράνεια και διάχυση.

## Όρος μεταφοράς – αδράνειας – βαρύτητας

Εφαρμόζουμε τη μέθοδο deferred correction ώστε να αποφύγουμε το μεγάλο υπολογιστικό χωρίο που απαιτείται για σχήματα υψηλής τάξης, οπότε χωρίζουμε τη ροή μάζας λόγω μεταφοράς-αδράνειας-βαρύτητας σε δύο μέρη (βλ. εξίσωση [48]), το ένα από τα οποία υπολογίζεται από τα γνωστά μεγέθη της προηγούμενης επανάληψης (explicit term) και το άλλο περιέχει τους αγνώστους της τρέχουσας επανάληψης (implicit term).

Συγκεκριμένα είναι:

$$J_l^c = \int_S c \mathbf{u}_c \cdot d\mathbf{S} \approx \dot{m}_l C_l = J_{l,imp}^c + J_{l,exp}^c \quad [48]$$

όπου για τον implicit όρο χρησιμοποιούμε upwind σχήμα 1<sup>ης</sup> τάξης, δηλαδή:

$$J_{l,imp}^c = \max(\dot{m}_l, 0) C_P + \min(\dot{m}_l, 0) C_L, \quad \begin{array}{l} l = t,b,e,w,n,s \\ L = T,B,E,W,N,S \end{array} \quad [49]$$

ενώ για τον explicit όρο υπολογίζουμε τη διαφορά μεταξύ του σχήματος UDS και του σχήματος 2<sup>ης</sup> τάξης CDS:

$$J_{l,exp}^c = G \left\{ \underbrace{\left[ \dot{m}_l^{inr} (F \cdot C_L + (1-F) C_P + gradc|_l) \right]}_{\dot{m}_l^{inr} \cdot C_L^{CDS}} - \underbrace{\left[ \max(\dot{m}_l^{inr}, 0) C_P + \min(\dot{m}_l^{inr}, 0) C_L \right]}_{\dot{m}_l^{inr} \cdot C_l^{UDS}} \right\}^{old}$$

όπου όπως φαίνεται, ο πρώτος όρος είναι 2<sup>ης</sup> τάξης και ο δεύτερος είναι 1<sup>ης</sup> τάξης.  $G$  είναι ένας συντελεστής που μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε υβριδικό σχήμα deferred correction, με  $0 < G < 1$ .

Μετά από επαναλήψεις, οι όροι 1<sup>ης</sup> τάξης (UDS) απαλείφονται, δίνοντας τελικά ακρίβεια 2<sup>ης</sup> τάξης για τον όρο της μεταφοράς-αδράνειας.

## Όρος διάχυσης

Για τον όρο διάχυσης  $J_l^d$  προτιμάται σχήμα CDS 2<sup>ης</sup> τάξης:

$$J_l^d = \frac{1}{Pe} \int_{S_l} \nabla c \cdot \mathbf{n} dS = \frac{1}{Pe} \int_{S_l} \frac{\partial c}{\partial n} dS \approx \frac{1}{Pe} \frac{\partial c}{\partial n} \Big|_l S_l = J_{l,imp}^d + J_{l,exp}^d \quad [50]$$

όπου

$$J_{l,imp}^d = \frac{S_l}{Pe} \frac{C_L - C_P}{L_{P,L}} \quad \text{και} \quad J_{l,exp}^d = \frac{S_l}{Pe} \left[ \frac{\partial \bar{c}}{\partial n} \Big|_l - \frac{\partial \bar{c}}{\partial \xi} \Big|_l \right]^{old} \quad [51]$$

όπου

$$\left( \frac{\partial \bar{c}}{\partial n} \Big|_l \right)^{old} = \nabla c \cdot \mathbf{S}_l = \left[ \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_l S_{lx} + \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_l S_{ly} + \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_l S_{lz} \right]^{old} \quad [52]$$

και

$$\left( \frac{\partial \bar{c}}{\partial \xi} \Big|_l \right)^{old} = \nabla c \cdot \mathbf{i}_\xi S_l = \frac{S_l}{L_{P,L}} \left[ \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_l (x_L - x_P) + \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_l (y_L - y_P) + \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_l (z_L - z_P) \right]^{old}$$

Άρα τελικά παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \sum_l J_l = 0 &\Rightarrow \sum_l (J_l^c - J_l^d) = 0 \Rightarrow \sum_l (J_{l,imp}^c + J_{l,exp}^c - J_{l,imp}^d - J_{l,exp}^d) = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow a_P c_P + \sum_{l,L} (a_L c_L) = q \end{aligned} \quad [53]$$

$$\text{που είναι το τελικό σύστημα με:} \quad a_P = - \sum_{l,L} (a_L - \dot{m}_l^{c,i}) \quad [54]$$

## Οριακές συνθήκες

Θεωρούμε ομοιόμορφη και μοναδιαία κατανομή συγκέντρωσης στην είσοδο του αγωγού και πλήρη απορρόφηση πάνω στο τοίχωμα χωρίς να υπάρχει εισροή ή εκροή σωματιδίων:

$$c|_{inlet} = 1 \quad \text{και} \quad c|_{wall} = 0 \quad [55]$$

Και από την σχέση [55] προκύπτει η ροή μάζας στο τοίχωμα λόγω διάχυσης:

$$J^d|_w = -\frac{1}{Pe} \int_{S_l} \nabla c \cdot \mathbf{n} dS \Big|_w \quad [56]$$

Επιπλέον, πρέπει να δοθεί προσοχή στη μη μηδενική ταχύτητα που έχουν τα σωματίδια ακριβώς πριν το τοίχωμα, λόγω των εξωτερικών δυνάμεων (π.χ. βαρύτητα). Εισάγουμε την παρακάτω συνθήκη για τη ροή μάζας λόγω μεταφοράς κοντά στο τοίχωμα:

$$J^c|_w = \begin{cases} 0 & \text{if } \mathbf{u}_c \cdot \mathbf{dS}|_w = \leq 0 \\ \int_S c \mathbf{u}_c \cdot dS \Big|_w & \text{if } \mathbf{u}_c \cdot \mathbf{dS}|_w = > 0 \end{cases} \quad [57]$$

όπου η  $\mathbf{u}_p$  υπολογίζεται στον κόμβο ακριβώς πριν το τοίχωμα. Η συνθήκη [57] εξασφαλίζει ότι αν έχουμε ροή προς το τοίχωμα αυτή θα είναι ίση με αυτή ακριβώς πριν το τοίχωμα ενώ αν έχουμε ροή από το τοίχωμα προς το εσωτερικό, η ροή μάζας θα μηδενίζεται. Τελικά, η συνολική ροή μάζας στο τοίχωμα, ή αλλιώς η ροή των σωματιδίων που επικάθονται, αποτελεί το άθροισμα των σχέσεων [56] και [57], δηλαδή:

$$J_{dep} = J^c|_w + J^d|_w \quad [58]$$

Στην την είσοδο του αγωγού χρησιμοποιείται συνθήκη Dirichlet, δίνεται δηλαδή το προφίλ της συγκέντρωσης (ομοιόμορφο, παραβολικό κ.ο.κ.)

Στην έξοδο επιβάλλεται συνθήκη Neumann, δηλαδή ορίζεται η κλίση της συγκέντρωσης (την οποία και θέτουμε μηδέν).

Το σύστημα των εξισώσεων για τη συγκέντρωση λύνεται με τον επαναληπτικό αλγόριθμο SIP (Strong Implicit Procedure).

### 3.4.2 Φιλτράρισμα λύσης και απομάκρυνση αρνητικών τιμών

Παρατηρήθηκε ότι κατά τη σύγκλιση του κώδικα σωματιδίων παρουσιάζονταν αρνητικές τιμές συγκεντρώσεως σε ορισμένα σημεία, και μερικές φορές αυτές ήταν σημαντικές, οδηγώντας σε μη αποδεκτή λύση από φυσικής σκοπιάς, αφού η απώλεια μάζας ήταν αδύνατη για τις περιπτώσεις που προσομοιώσαμε. Στη βιβλιογραφία το φαινόμενο αυτό δεν είναι πρωτόγνωρο, αλλά το συναντούμε συχνά σε περιπτώσεις αριθμητικών μεθόδων που χρησιμοποιούν την προσέγγιση κατά Euler, ειδικά σε προβλήματα μεταφοράς όπου ο όρος μεταφοράς είναι αρκετά σημαντικός. Στις περιπτώσεις αυτές, οι αρνητικές τιμές, εκτός από αφύσικες, μπορεί να οδηγήσουν και σε αστάθεια.

Το πρόβλημα των αρνητικών τιμών μπορεί να αντιμετωπιστεί με διάφορους τρόπους, όπως η κατασκευή πιο πολύπλοκου μοντέλου μεταφοράς ή πιο απλά με την εφαρμογή αριθμητικού φίλτρου στη λύση. Υπάρχουν διάφοροι αλγόριθμοι φιλτραρίσματος της λύσης, ένας από τους οποίους περιγράφεται και στην εργασία του Bartnicki (1989), τον οποίο και υιοθετήσαμε στο παρόν μοντέλο. Σύμφωνα με αυτόν, ένα ιδανικό φίλτρο θα πρέπει να ικανοποιεί τα εξής κριτήρια: (1) Να απομακρύνει εντελώς τις αρνητικές τιμές, (2) Να διατηρεί τη συνολική μάζα, (3) Να μην αλλάζει το σχήμα της συνάρτησης, (4) Να διατηρεί τα ακρότατα, (5) Να μην περιέχει «θόρυβο» με τη μορφή κυμάτων. Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιήσαμε ικανοποιεί τα σημεία (1) και (2) ενώ προσεγγίζει σε αρκετά ικανοποιητικό βαθμό τα υπόλοιπα.

Η βασική ιδέα του αλγορίθμου έγκεται στον εντοπισμό όλων των αρνητικών μαζών, στο άθροισμά τους και στη συνέχεια στην ομοιόμορφη αναδιανομή τους σε όλους τους κόμβους θετικής μάζας. Ακολουθείται επαναληπτική διαδικασία μέχρι να εξαφανιστούν πλήρως οι αρνητικές τιμές. Αποδεικνύεται ότι η φιλτραρισμένη λύση ικανοποιεί τη διατήρηση μάζας με σφάλμα  $\pm 0.0001\%$  ενώ αυξάνει τον υπολογιστικό χρόνο το πολύ κατά 4%. Στον πίνακα [3.3] δίνονται ενδεικτικά οι τιμές των ακροτάτων πριν και μετά την εφαρμογή του φίλτρου για δύο τυχαίες περιπτώσεις.

Iterations	Min (c)	Max (c)
0	-0.2896965	2.6669610
1	-0.0036878	2.6631504
2	0.0000000	2.6631490
0	-2.1136158	24.9918632
1	-0.0058703	24.9859729
2	0.0000000	24.9859713

**Πίνακας 3.3** Επίδραση του αλγορίθμου φίλτρου στα ακρότατα της συγκέντρωσης

### 3.4.3 Υπολογισμός συνολικής και τοπικής εναπόθεσης

Αφού έχει υπολογιστεί το πεδίο συγκεντρώσεως μπορούμε να υπολογίσουμε την *συνολική εναπόθεση*. Για τη συνολική εναπόθεση υπολογίζεται η ροή μάζας των σωματιδίων στην είσοδο του αγωγού σύμφωνα με τη γενική σχέση:

$$\dot{m}_p \Big|_A = \int_A c \mathbf{u}_c \cdot \mathbf{n} dS \quad [59]$$

όπου  $\mathbf{n}$  το κάθετο διάνυσμα στη διατομή. Στο διακριτό χωρίο το ολοκλήρωμα απλοποιείται στο άθροισμα για την πλευρά των πεπερασμένων όγκων της εισόδου του γινομένου της συγκέντρωσης με την κάθετη συνιστώσα της ταχύτητας μεταφοράς. Ακριβώς με τον ίδιο τρόπο υπολογίζουμε τη ροή μάζας σωματιδίων σε κάθεμια από τις εξόδους. Τελικά, η διαφορά τους μας δίνει τα σωματίδια που εναποτέθηκαν στον αγωγό, και για επί τοις εκατό (%) ποσοστό χρησιμοποιούμε τη σχέση:

$$\text{Total Deposition (\%)} = \left( 1 - \frac{\sum \dot{m}_p \Big|_{outlet}}{\dot{m}_p \Big|_{inlet}} \right) \cdot 100\% \quad [60]$$

Επίσης υπολογίζουμε την *τοπική εναπόθεση* συναρτήσει της αξονικής απόστασης από την είσοδο. Η διαδικασία που ακολουθούμε είναι ίδια (βλ. προηγούμενη σχέση) μόνο που αντί να υπολογίζουμε τη ροή μάζας σωματιδίων στις εξόδους, την υπολογίζουμε σε διάφορες διατομές του αγωγού (5, 10, 15 % του συνολικού μήκους κ.ο.κ.), οι οποίες όμως παραμένουν κάθετες στον κατά μήκος άξονα. Τελικά, υπολογίζοντας την ποσοστιαία διαφορά από την είσοδο καταλήγουμε στην τοπική εναπόθεση κατά μήκος του αγωγού, σύμφωνα με τη σχέση:

$$\text{Local Deposition}_{\text{axial distance}} (\%) = \left( 1 - \frac{\sum \dot{m}_p \Big|_{\text{axial distance}}}{\dot{m}_p \Big|_{inlet}} \right) \cdot 100\% \quad [61]$$





## 4 Αποτελέσματα ροών

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιαστούν οι ακριβείς παράμετροι της ροής και των σωματιδίων που προσομοιώθηκαν καθώς και αρκετά αποτελέσματα, με τη μορφή διαγραμμάτων και εικόνων. Λόγω των πολλών περιπτώσεων που εξετάστηκαν και του πλήθους των διαφορετικών παραμέτρων κρίθηκε αδύνατο να παρουσιαστούν όλα τα νούμερα και τα πιθανά σχήματα και διαγράμματα, τα οποία, εκτός του ότι θα κούραζαν τον αναγνώστη είναι πιθανό να οδηγούσαν σε σύγχυση. Για αυτό το λόγο θα επικεντρωθούμε σε επιλεγμένες συγκρίσεις και λεπτομέρειες, προσπαθώντας να εξάγουμε ασφαλή και ορθά συμπεράσματα σχετικά με συμπεριφορά τόσο του ρευστού, όσο και των σωματιδίων, κατά την κίνησή τους σε διακλαδούμενο αγωγό.

Σε όλες τις περιπτώσεις το ρευστό που χρησιμοποιήθηκε ήταν *αέρας στους 20 °C*, για τον οποίο ισχύουν τα παρακάτω μεγέθη:

- Πυκνότητα:  $\rho = 1.2 \frac{kg}{m^3}$
- Δυναμική συνεκτικότητα:  $\mu = 1.81 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{m \cdot sec}$
- Ειδική θερμότητα:  $C_p = 1005.2019 \frac{J}{kg \cdot K}$

Οι οριακές συνθήκες ήταν αδιάστατη ταχύτητα ίση με τη μονάδα στην είσοδο και αδιάστατοποιημένη πίεση ίση με τη μονάδα στις εξόδους. Χρησιμοποιήθηκε το σχήμα επίλυσης *Upwind* του ANSYS CFX και το κριτήριο σύγκλισης ήταν το μέγιστο σφάλμα (MAX) να μην ξεπερνά την τιμή  $10^{-4}$ .

### 4.1 Ασύμμετρες διακλαδώσεις τετραγωνικής διατομής

Για τις ασύμμετρες διακλαδώσεις τετραγωνικής διατομής που παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο 3.1.1, στις οποίες έχουμε γωνία κύριου με θυγατρικό αγωγό  $30^\circ$ ,  $60^\circ$  και  $90^\circ$  αντίστοιχα, εξετάσαμε δύο περιπτώσεις *Reynolds* ( $Re=100$  και  $Re=1000$ ) για δύο διαφορετικά προφίλ ταχύτητας στην είσοδο, το *ομοιόμορφο* (*uniform*) και το *παραβολικό* (*parabolic*). Όπως έχει αναφερθεί και στο κεφάλαιο 3, αδιαστατοποιούμε χρησιμοποιώντας την υδραυλική διάμετρο του αγωγού στην είσοδο (που στην περίπτωση του τετραγώνου ταυτίζεται με την ακμή) για τα μήκη και τη μέση ταχύτητα στην είσοδο για τις ταχύτητες. Από

τη σχέση που μας δίνει τον αριθμό *Reynolds* μπορούμε να υπολογίσουμε τις ταχύτητες στην είσοδο για κάθε περίπτωση:

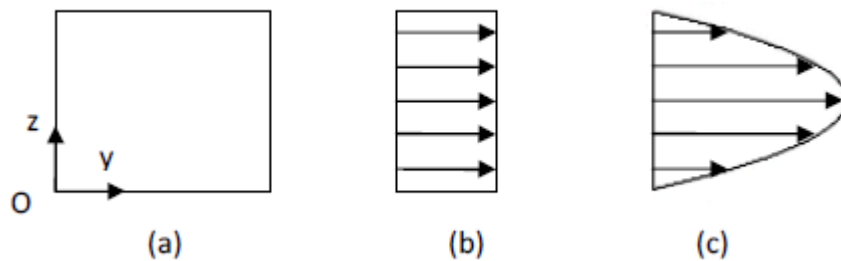
$$Re = \frac{u_m L}{\nu} = \frac{u_m L \rho}{\mu} \Rightarrow u_m = \frac{Re \cdot \mu}{L \rho}$$

οπότε παίρνουμε ότι:

$$^{(b)} Re = 100 \Rightarrow u_m = 0.269345 \text{ m/sec}$$

$$^{(b)} Re = 1000 \Rightarrow u_m = 2.69345 \text{ m/sec}$$

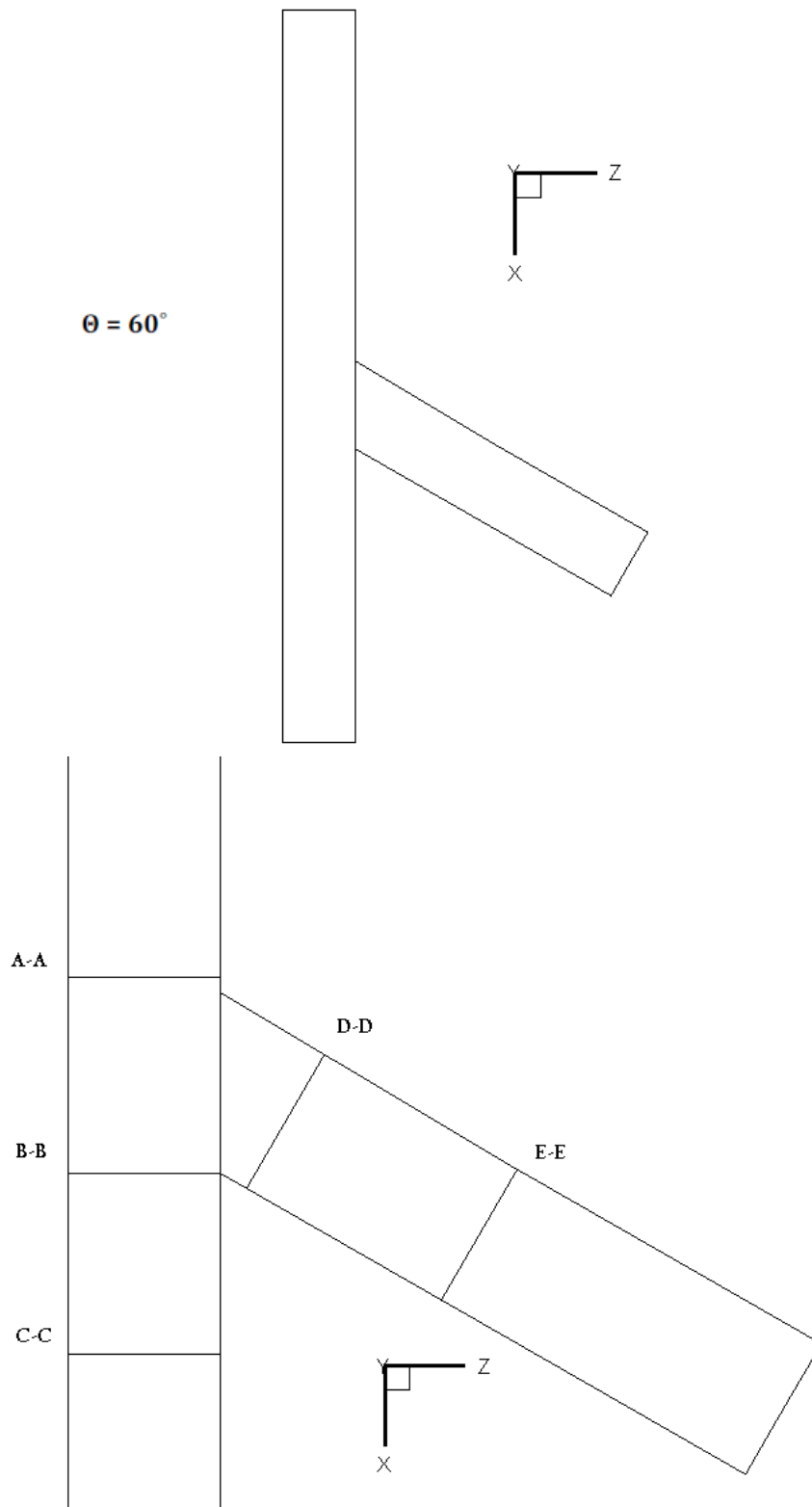
Οι εξισώσεις που χρησιμοποιήθηκαν για τα δύο προφίλ ταχύτητας στην είσοδο φαίνονται στο επόμενο σχήμα [4.1].



**Σχήμα 4.1** (a) Τετραγωνική διατομή, (b)  $u_{inlet} = u_m$ , (c)  $u_{inlet} = 36u_m \left( y + \frac{D_P}{2} \right) \left( z + \frac{D_P}{2} \right) yz$

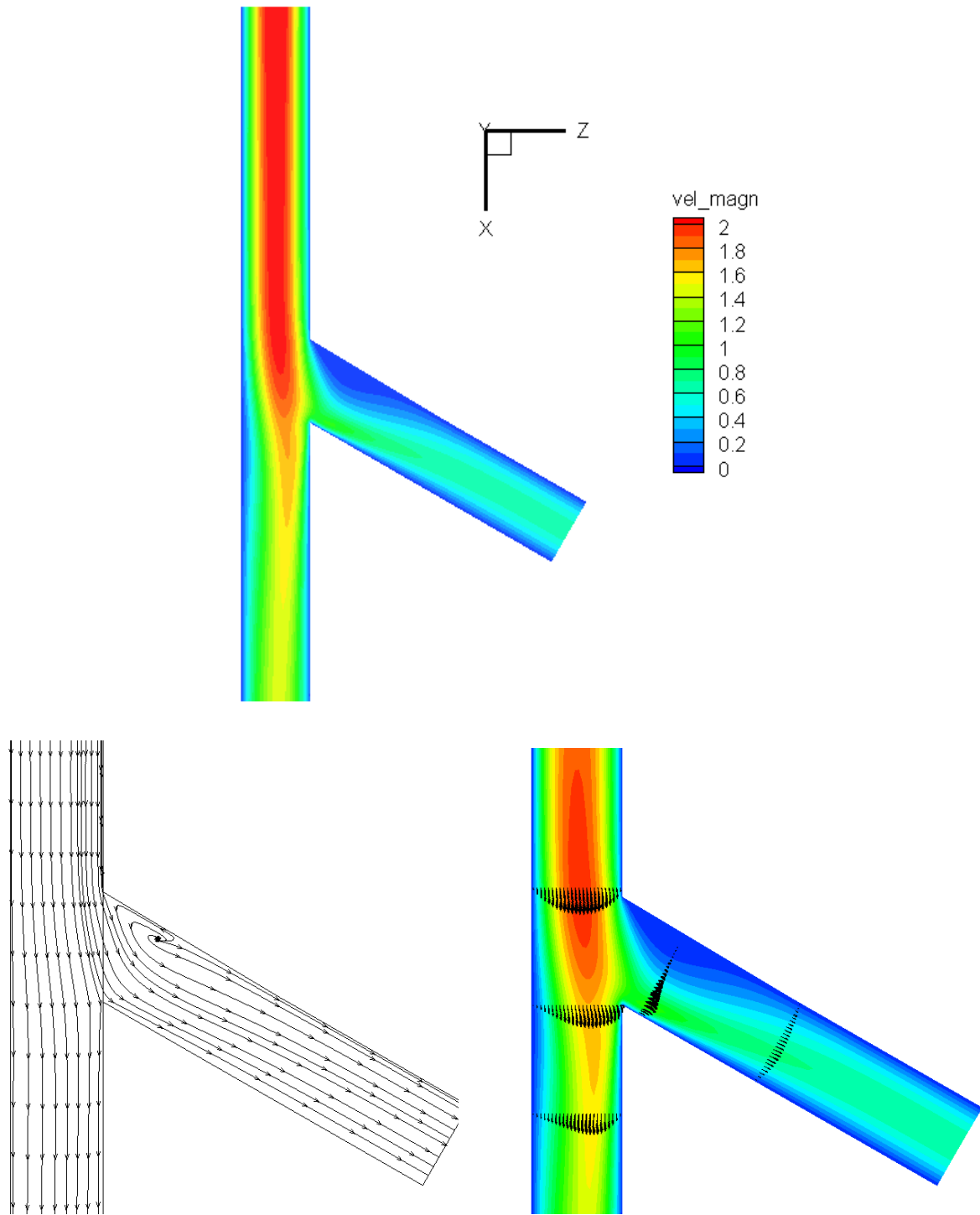
#### 4.1.1 Αποτελέσματα ροής ρευστού για διακλάδωση 60°

Όπως ήδη αναφέραμε, εξετάσαμε αγωγούς τριών διαφορετικών γωνιών, για δυο *Re* και δύο προφίλ ταχύτητας στην είσοδο, δηλαδή συνολικά δώδεκα περιπτώσεις. Θα δείξουμε αναλυτικά στοιχεία ροής μόνο για τη διακλάδωση των 60°, ώστε να γίνει και ευκολότερη η μετέπειτα σύγκριση με τις συμμετρικές διακλαδώσεις. Για τις γωνίες 30° και 90° θα παρουσιάσουμε συνοπτικά κάποια βασικά αποτελέσματα.



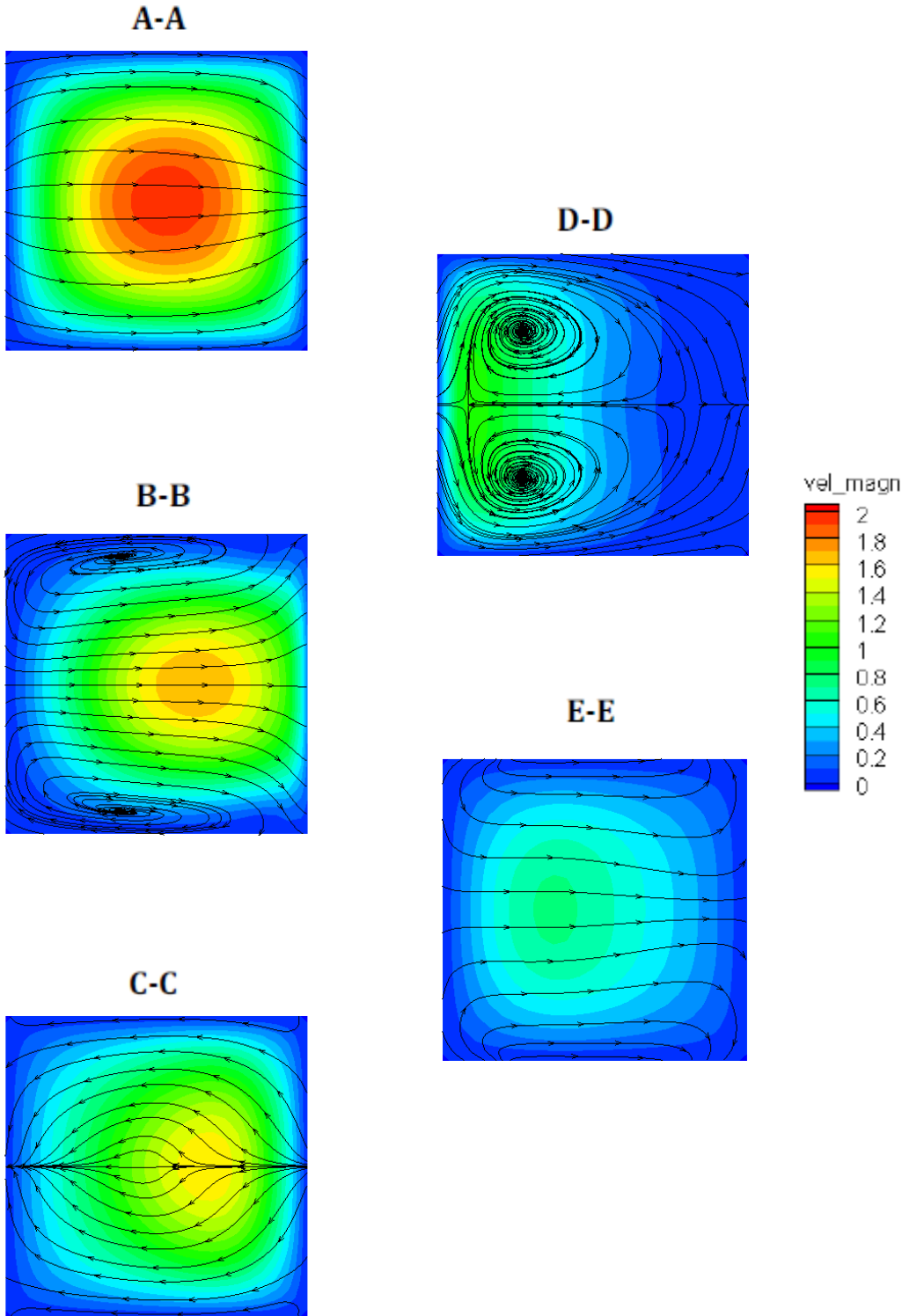
**Σχήμα 4.2** Ασύμμετρη διακλάδωση  $60^\circ$  και τομές

Re = 100  
Velocity profile at inlet: Uniform



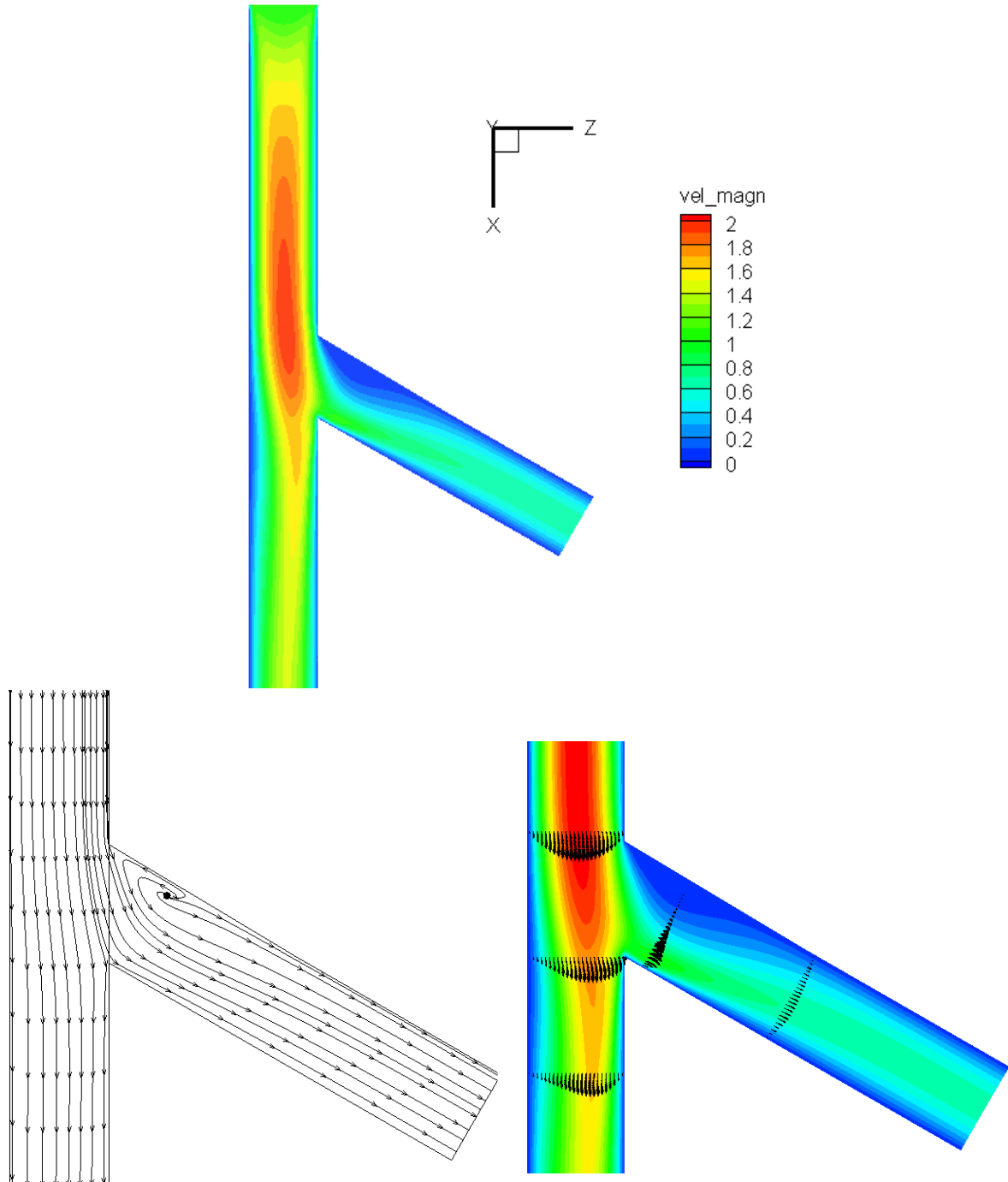
Σχήμα 4.3α

Re = 100  
Velocity profile at inlet: Uniform



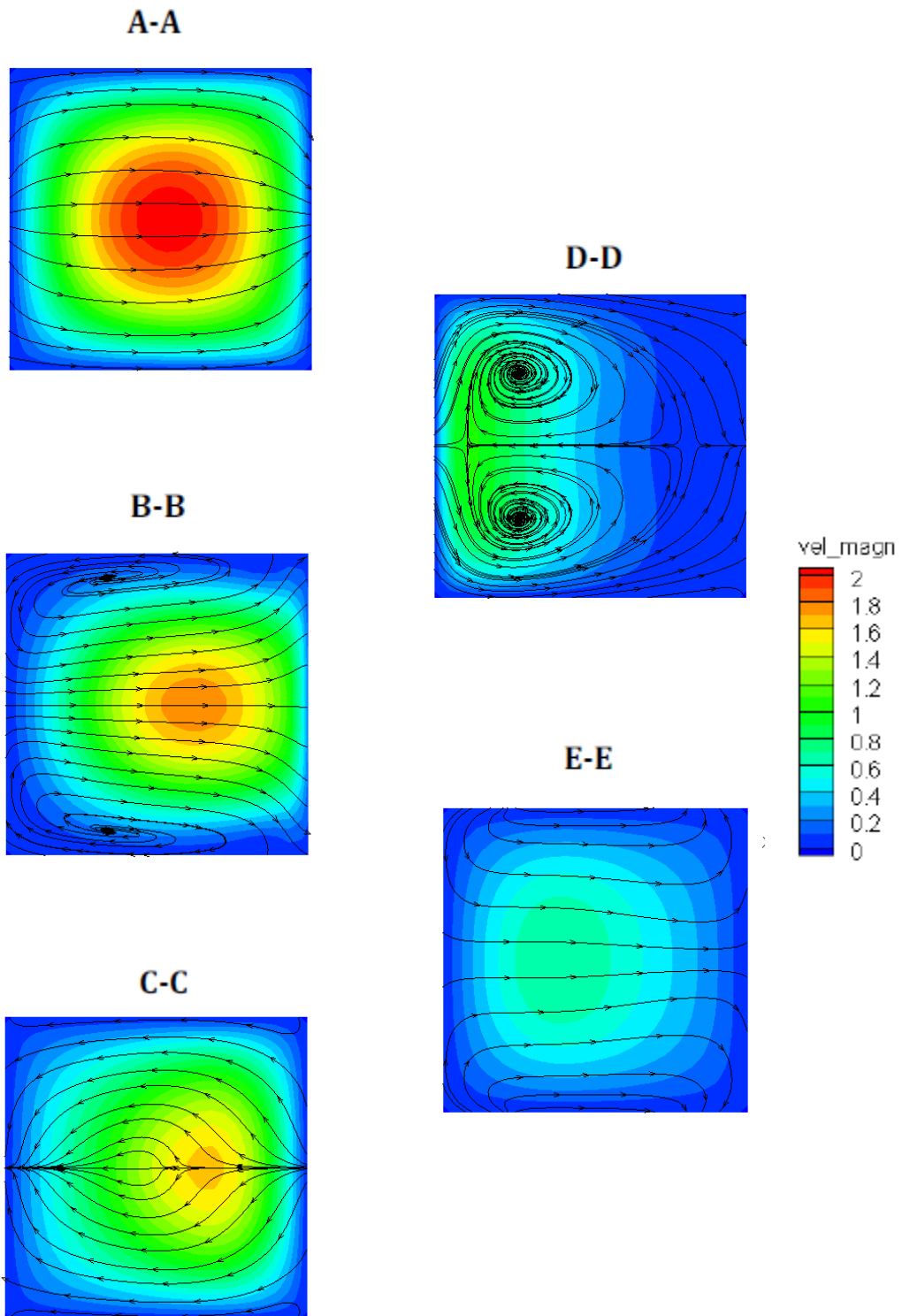
Σχήμα 4.3b

Re = 100  
Velocity profile at inlet: Parabolic



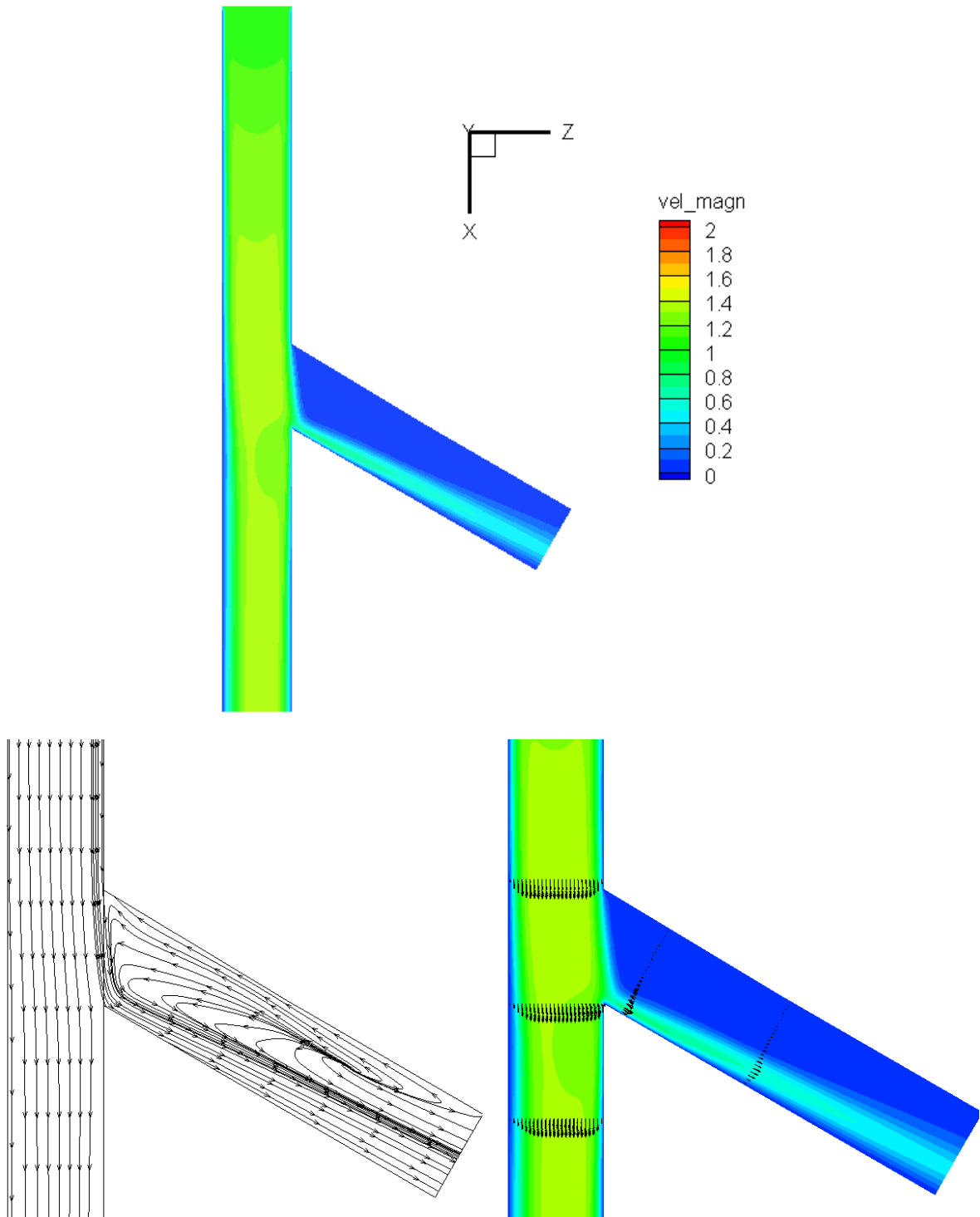
Σχήμα 4.4a

Re = 100  
Velocity profile at inlet: Parabolic



Σχήμα 4.4b

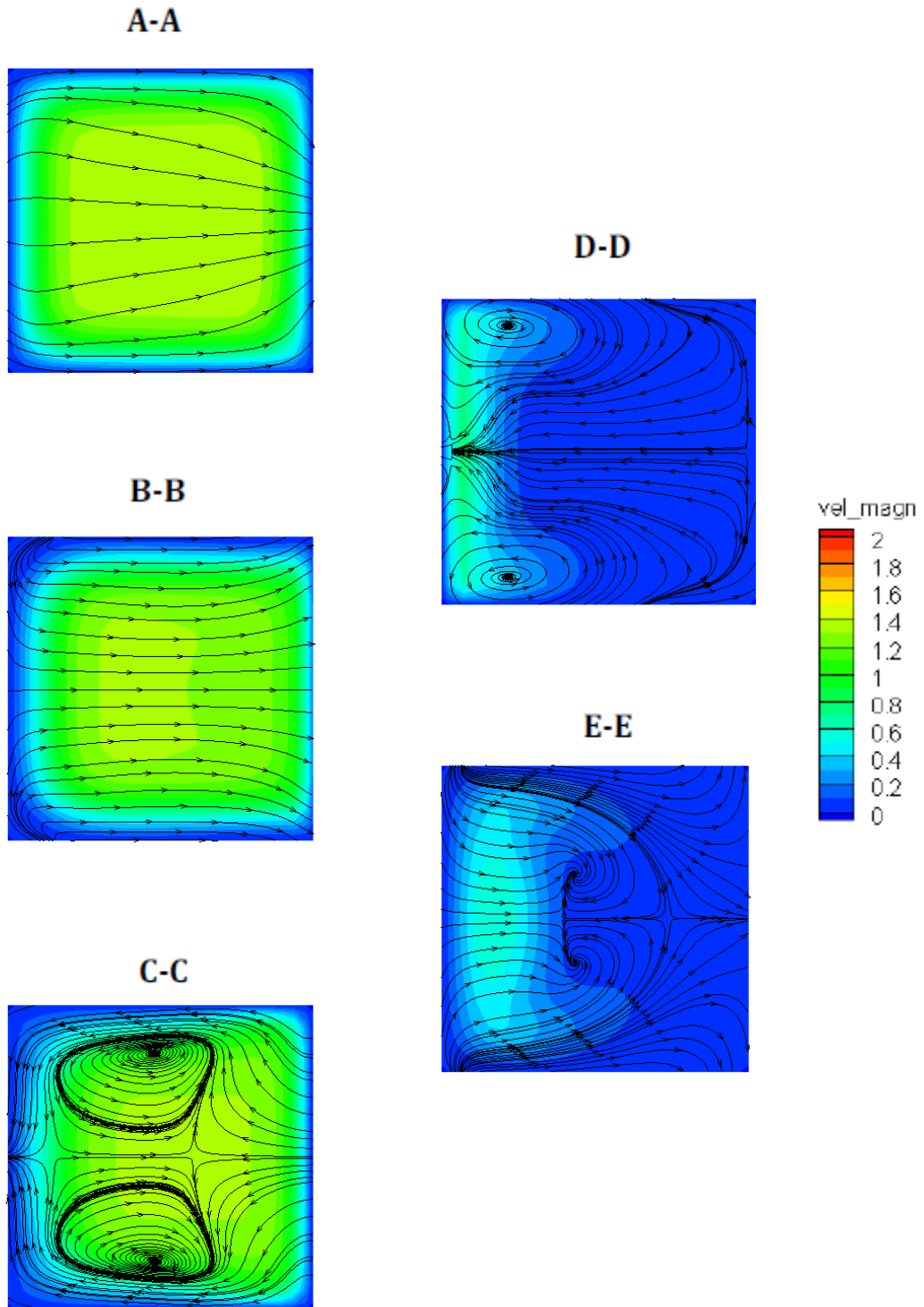
Re = 1000  
Velocity profile at inlet: Uniform



Σχήμα 4.5a

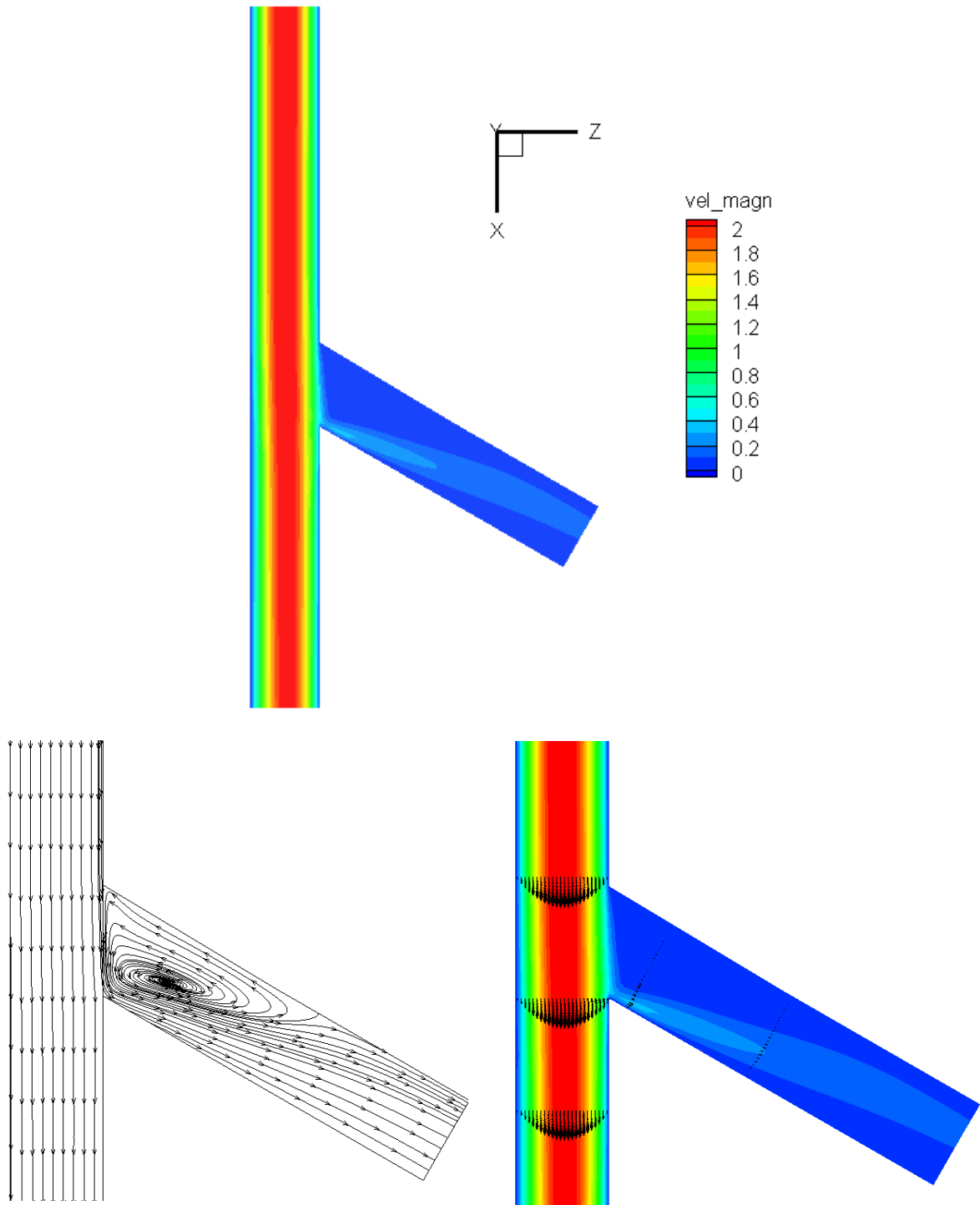


$Re = 1000$   
Velocity profile at inlet: Uniform



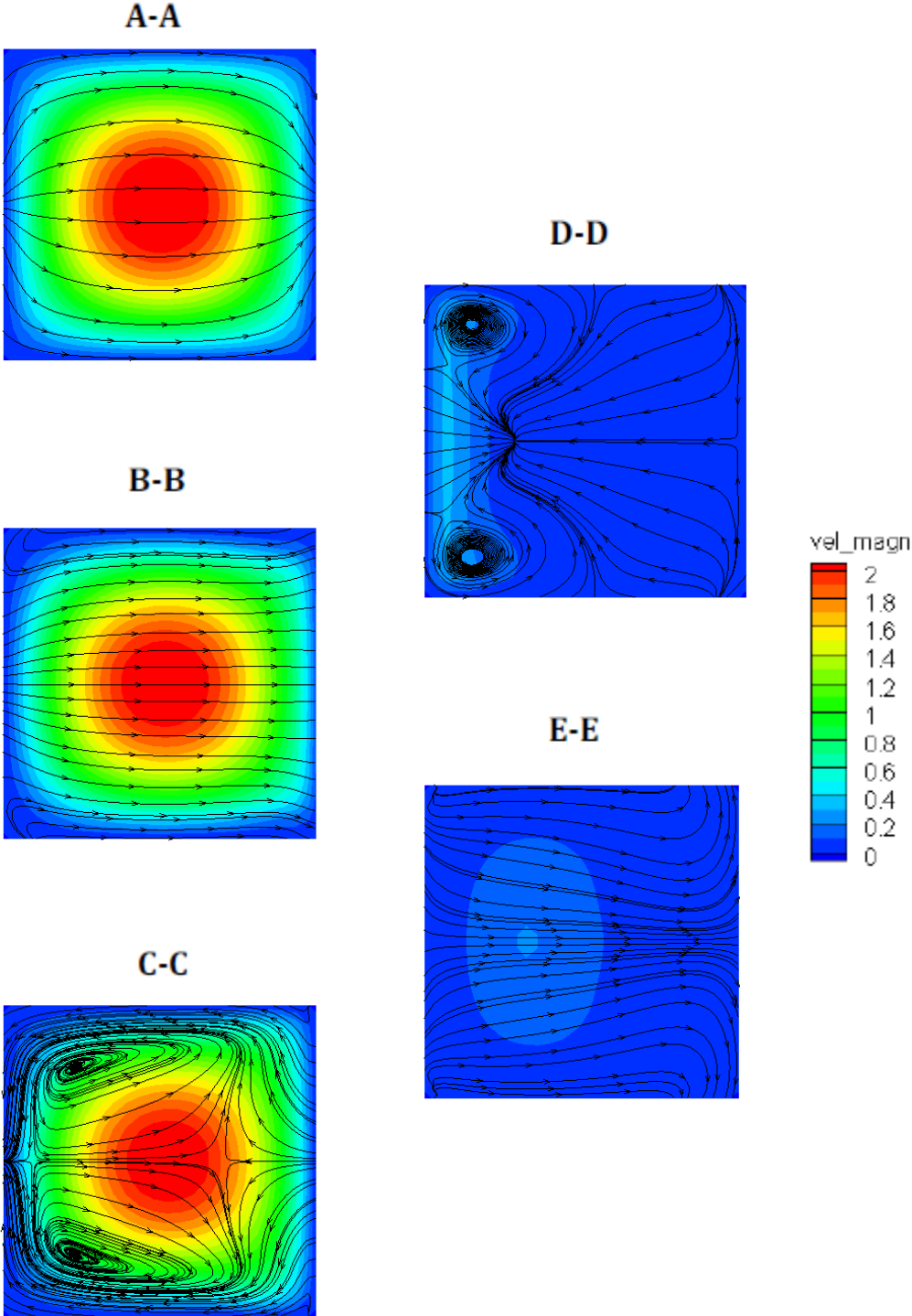
Σχήμα 4.5b

Re = 1000  
Velocity profile at inlet: Parabolic



Σχήμα 4.6α

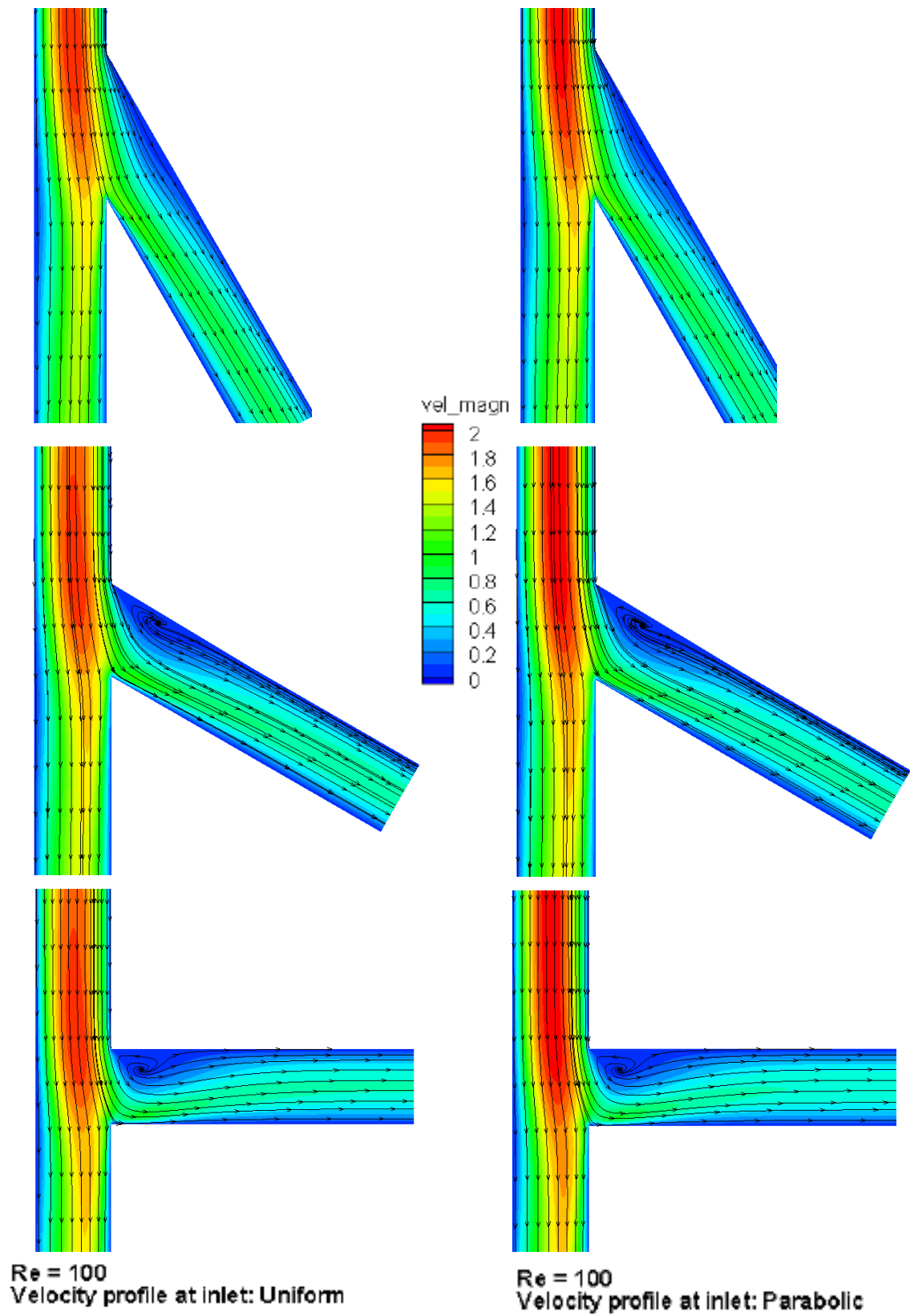
Re = 1000  
Velocity profile at inlet: Parabolic



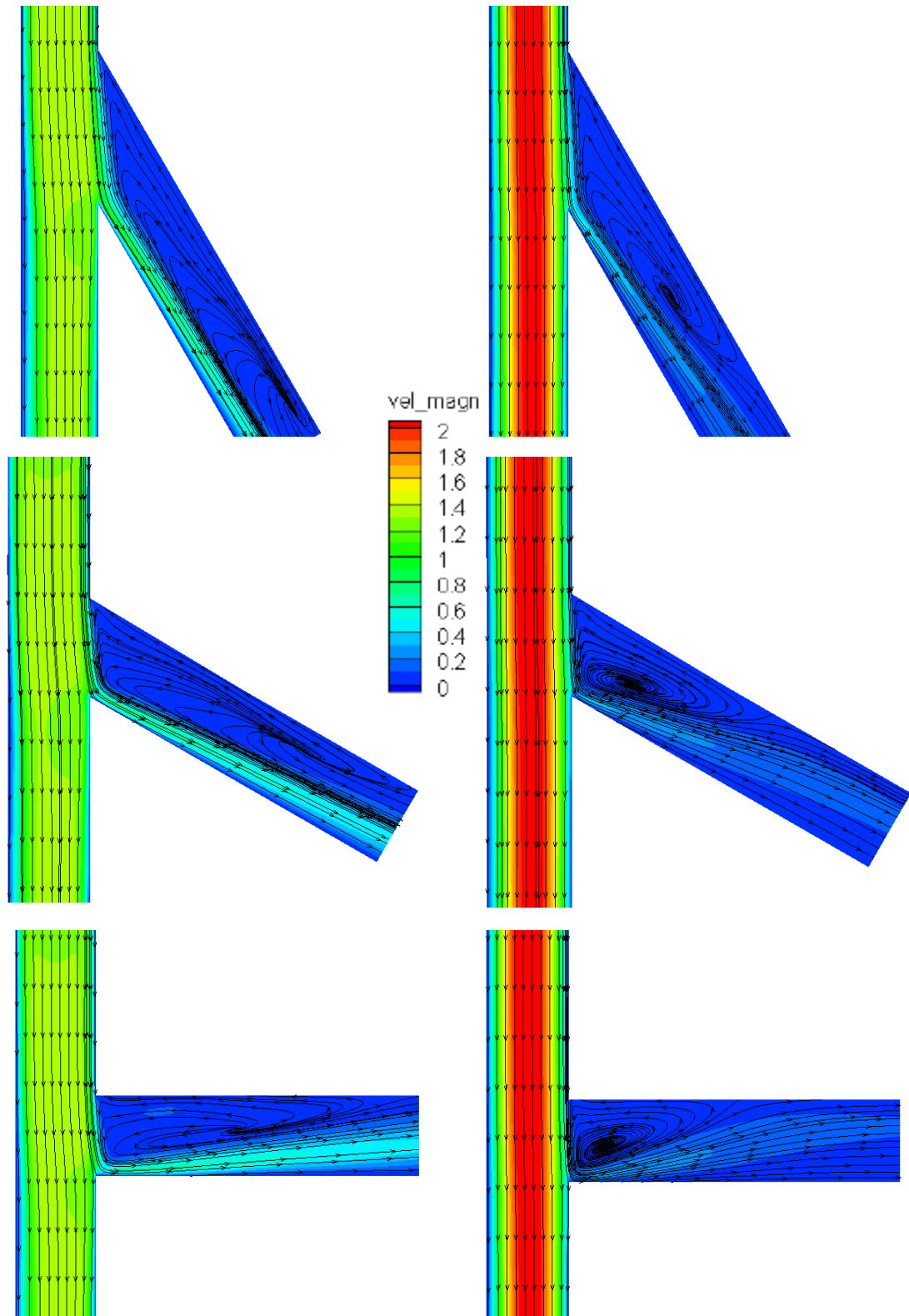
Σχήμα 4.6b

Πριν προχωρήσουμε στις διακλάδωσεις διαφορετικών γωνιών κρίνεται σκόπιμο να γίνουν κάποια σχόλια σε αυτό το σημείο, που πιθανόν να μας βοηθήσουν να κατανοήσουμε τη συμπεριφορά των σωματιδίων στη συνέχεια. Κατ'αρχήν, παρατηρούμε ότι για  $Re = 100$  (σχήματα [4.3a], [4.4a]) η επίδραση που έχει το προφίλ ταχύτητας εισόδου στη ροή δεν είναι σημαντική. Αυτό φαίνεται να οφείλεται στο ότι το ομοιόμορφο προφίλ, λόγω χαμηλού  $Re$ , προλαβαίνει να αναπτυχθεί, με αποτέλεσμα όταν φτάνει στη διακλάδωση η ροή να μην έχει σημαντικές διαφορές από το παραβολικό προφίλ, το οποίο και παραμένει αμετάβλητο μέχρι τη διακλάδωση. Έτσι, βλέπουμε ότι και οι τιμές της (αδιάστατης) ταχύτητας σε αυτή την περιοχή δε διαφέρουν σημαντικά (διαφορές τάξης του 0.5) , καθώς και ότι δημιουργείται δίνη ίδιας μορφής και στο ίδιο σημείο, δηλαδή στην εξωτερική πλευρά του θυγατρικού αγωγού. Η κύρια ροή, στο σημείο της διακλάδωσης επιβραδύνεται, όπως είναι αναμενόμενο, αφού έχουμε τη δημιουργία του δεύτερου ρεύματος κατά μήκος του θυγατρικού αγωγού, και μάλιστα κυρίως στην εσωτερική πλευρά αυτού, όπου είναι και περιοχή σημαντικής εναπόθεσης σωματιδίων. Παρατηρώντας την επίδραση των δευτερευουσών ροών (σχήματα [4.3b], [4.4b]) βλέπουμε ότι και εκεί οι διαφορές για τα δύο προφίλ είναι μικρές, με τη συνιστώσα κατά  $z$  να κυριαρχεί και να έχουμε τη δημιουργία δύο μικρών δινών στο εξωτερικό μέρος του κυρίου αγωγού, στο σημείο αμέσως μετά τη διακλάδωση (τομή C-C).

Στην περίπτωση όπου  $Re = 1000$  , τα πράγματα είναι λίγο διαφορετικά. Αρχικά, για το ομοιόμορφο προφίλ σημειώνουμε ότι μεταβάλλεται ανεπαίσθητα καθ'όλο το μήκος του κυρίου αγωγού, εκτός από μια τοπική επιβράδυνση στην περιοχή της διακλάδωσης, αφού, λόγω υψηλού  $Re$  δεν προλαβαίνει να αναπτυχθεί (σχήμα [4.5a]). Το ίδιο ισχύει και για το παραβολικό προφίλ, που παρουσιάζει ακόμα μικρότερη μεταβολή (σχήμα [4.6a]). Εντοπίζουμε την κύρια διαφορά των δύο ροών στο ότι για το παραβολικό προφίλ, το ρευστό σχεδόν δεν εισέρχεται στο θυγατρικό αγωγό. Αυτό προφανώς οφείλεται στη μορφή του προφίλ (χαμηλές ταχύτητες στα σημεία κοντά στο τοίχωμα και υψηλές κατά μήκος της κεντρικής γραμμής) καθώς και στον υψηλό  $Re$  που αυξάνει αρκετά το χρόνο αντίδρασης της ροής σε αλλαγές γεωμετρίας. Έτσι, η περιοχή της διατομής του κεντρικού αγωγού που βρίσκεται κοντά στη διακλάδωση χαρακτηρίζεται από αρκετά χαμηλές ταχύτητες και το ρευστό αποκλίνει ελάχιστα από την κατεύθυνση της κύριας ροής (βλ. τομή A-A). Αντίθετα, για το ομοιόμορφο προφίλ, που όπως είπαμε δεν αναπτύσσεται ιδιαίτερα, αυτή η περιοχή της διατομής έχει σημαντική ταχύτητα (βλ. τομή A-A), οπότε και παρατηρούμε μια λεπτή δέσμη να αποσπάται από την κύρια ροή και να εισέρχεται στο θυγατρικό αγωγό. Όπως είναι αναμενόμενο δημιουργείται μια μεγάλη δίνη, η οποία εκτείνεται μέχρι την έξοδο. Όπως θα δούμε παρακάτω, εξ'αίτιας αυτής της δέσμης αναμένουμε σημαντικά μεγαλύτερη εναπόθεση σωματιδίων στην περίπτωση του ομοιόμορφου προφίλ. Συνεχίζουμε δείχνοντας συνοπτικά την επίδραση που έχει η γωνία στο πεδίο ροής.



Σχήμα 4.7a



Re = 1000  
Velocity profile at inlet: Uniform

Re = 1000  
Velocity profile at inlet: Parabolic

Όπως φαίνεται και από τα παραπάνω σχήματα ([4.7a], [4.7b]), για την περίπτωση του χαμηλού  $Re$ , δεν δημιουργείται δίνη για γωνίες μικρότερες των  $30^\circ$ , ανεξαρτήτως προφίλ ταχύτητας στην είσοδο. Αυτή είναι και η μόνη διαφοροποίηση για περιοχές τόσο χαμηλού  $Re$ , αφού πέρα από την προφανώς μεγαλύτερη στροφή της ροής για μεγαλύτερες γωνίες, οι ροές έχουν ίδια χαρακτηριστικά.

Για μεγάλα  $Re$ , η αλλαγή της γωνίας επηρεάζει κυρίως τη θέση της δίνης στον θυγατρικό αγωγό, η οποία απομακρύνεται όσο μειώνεται η γωνία, γεγονός που είναι αναμενόμενο αφού τότε οι κλίσεις ταχύτητας είναι μικρότερες και η αποκόλληση συμβαίνει σε μεγαλύτερη απόσταση.

## 4.2 Συμμετρική διακλάδωση κυκλικής διατομής

Σε αυτή την περίπτωση εξετάσαμε δύο περιπτώσεις *Reynolds* ( $Re = 1132$  και  $Re = 1788$ ) με προφίλ ταχύτητας στην είσοδο πλήρως ανεπτυγμένο παραβολικό. Όπως αναφέρουν και οι Kim et al. (1994) και Longest & Vinchurkar (2007), για  $Re = 1788$  οι συνθήκες αυτές προσεγγίζουν αρκετά ικανοποιητικά τις πραγματικές συνθήκες ροής των γενεών G3-G4, σύμφωνα με το μοντέλο του Weibel (1963), της αναπνευστικής οδού κατά την εισπνοή ενήλικα κατά τη διάρκεια βαριάς άσκησης. Η παροχή μάζας που προκύπτει στη γενιά G3 είναι περίπου  $125 \text{ ml/sec}$ , όπως έχει διαπιστωθεί και από διάφορα πειράματα (π.χ. Oldham et al, 2000).

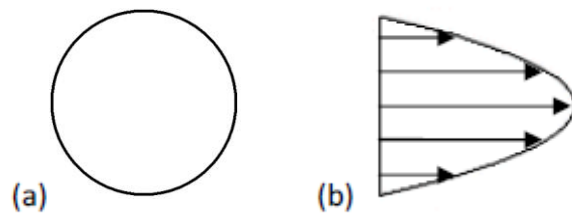
Αδιαστατοποιούμε χρησιμοποιώντας την υδραυλική διάμετρο του αγωγού στην είσοδο (που στην περίπτωση της κυκλικής διατομής ταυτίζεται με τη γεωμετρική διάμετρο) για τα μήκη και τη μέση ταχύτητα στην είσοδο για τις ταχύτητες. Όπως και πριν, από τη σχέση που μας δίνει τον αριθμό *Reynolds* μπορούμε να υπολογίσουμε τις ταχύτητες στην είσοδο για κάθε περίπτωση:

οπότε παίρνουμε ότι:

$$^{(b)} Re = 1132 \Rightarrow u_m = 3.05 \text{ m/sec}$$

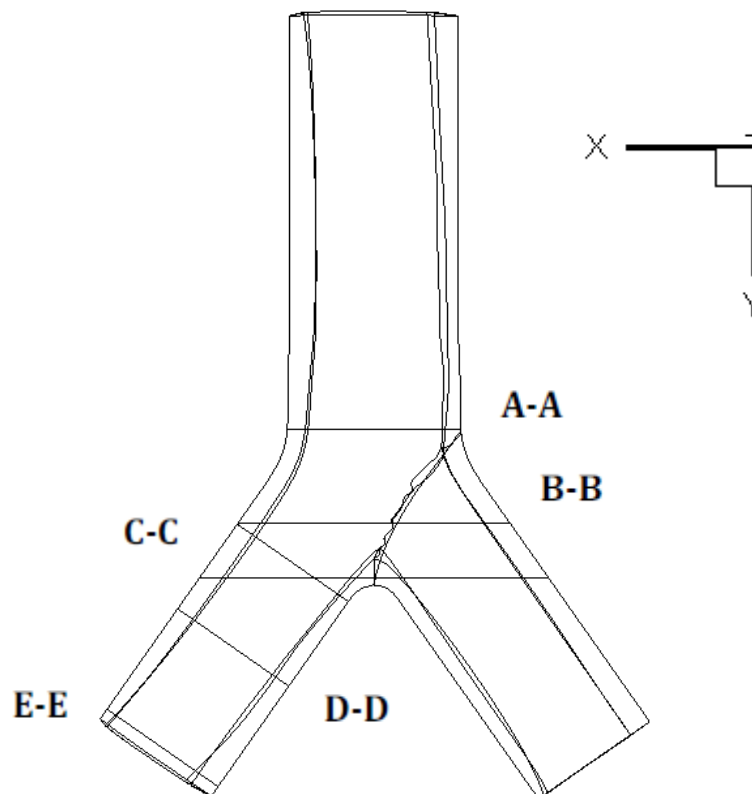
$$^{(b)} Re = 1778 \Rightarrow u_m = 5.07509 \text{ m/sec}$$

Οι εξισώσεις που χρησιμοποιήθηκαν για τα δύο προφίλ ταχύτητας στην είσοδο φαίνονται στο σχήμα [4.8].



**Σχήμα 4.8** (a) Κυκλική διατομή, (b)  $u_{inlet} = 2u_m \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right]$ ,  $r = \sqrt{(x^2 + z^2)}$

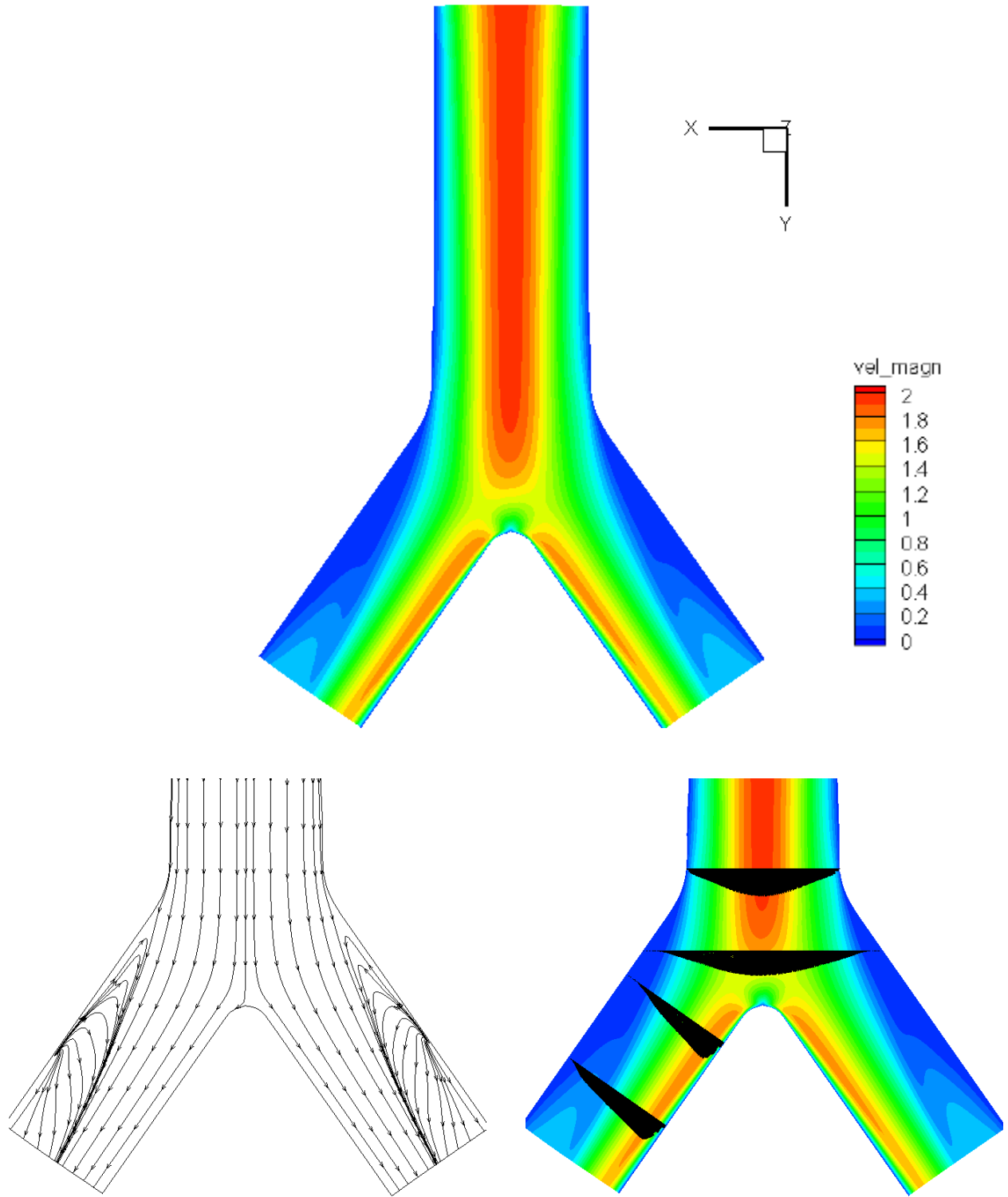
Ακολουθούν τα αποτελέσματα της ροής για τους δύο  $Re$ .



**Σχήμα 4.9** Συμμετρική διακλάδωση κυκλικής διατομής και τομές

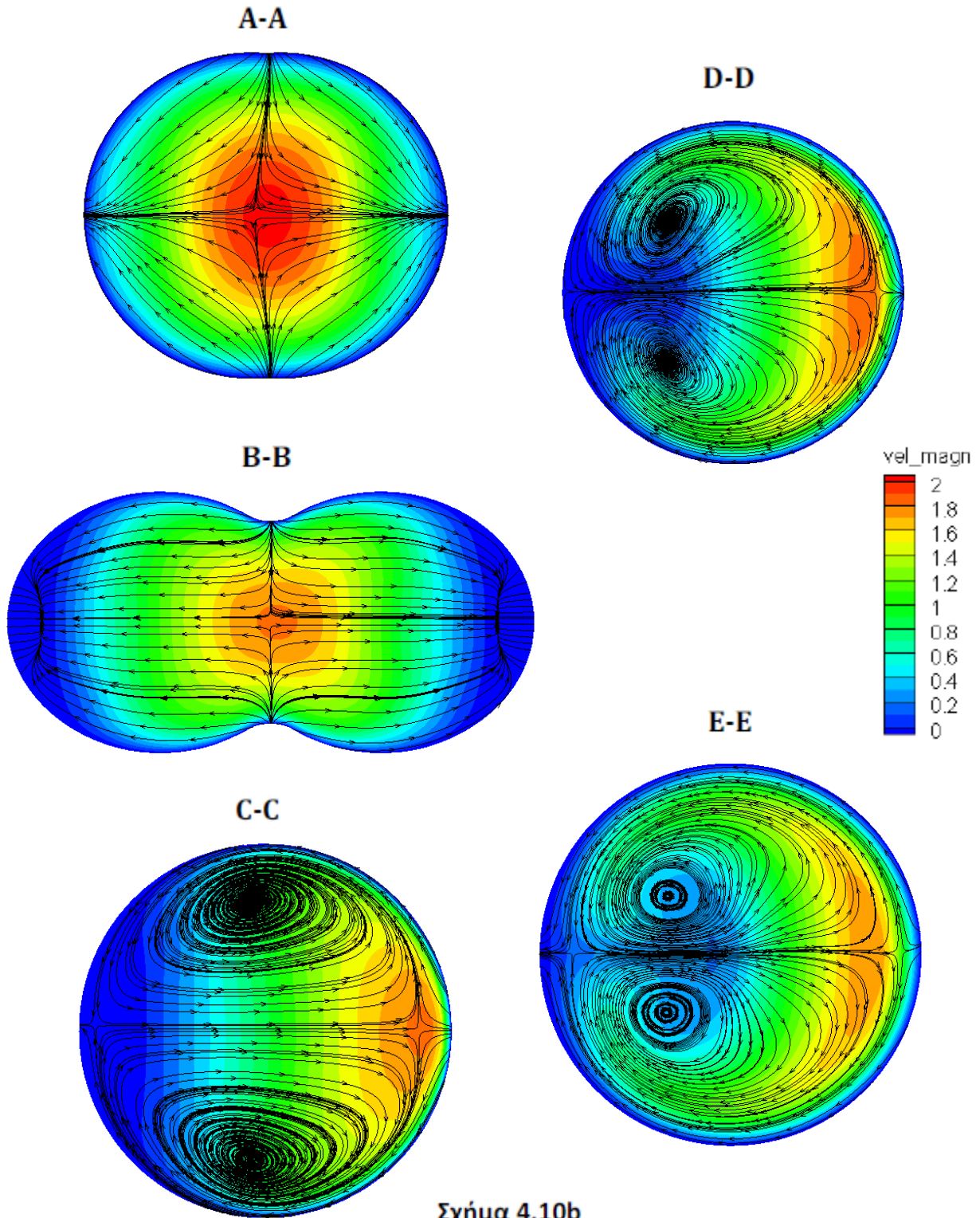


Re = 1132



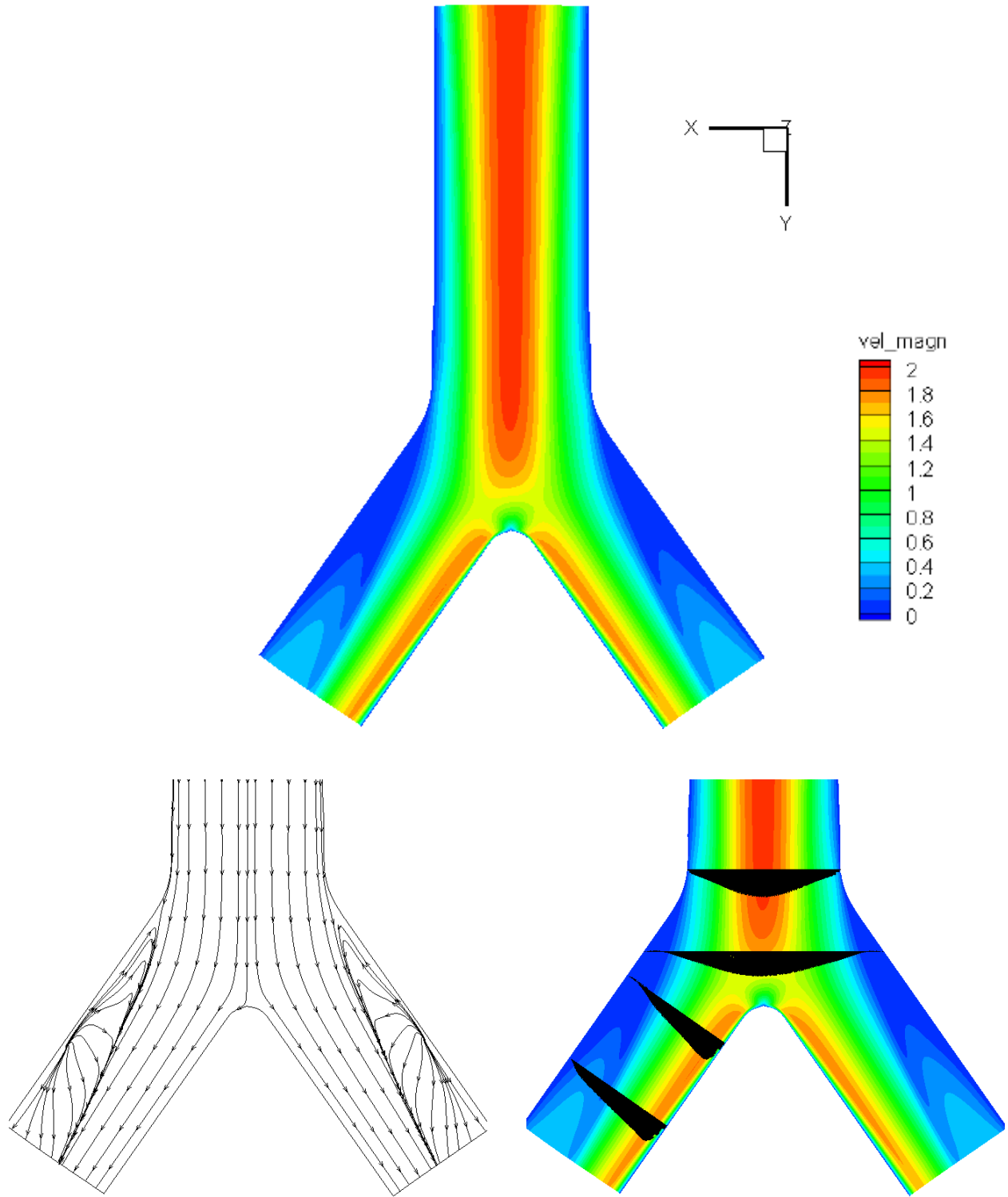
Σχήμα 4.10a

Re = 1132



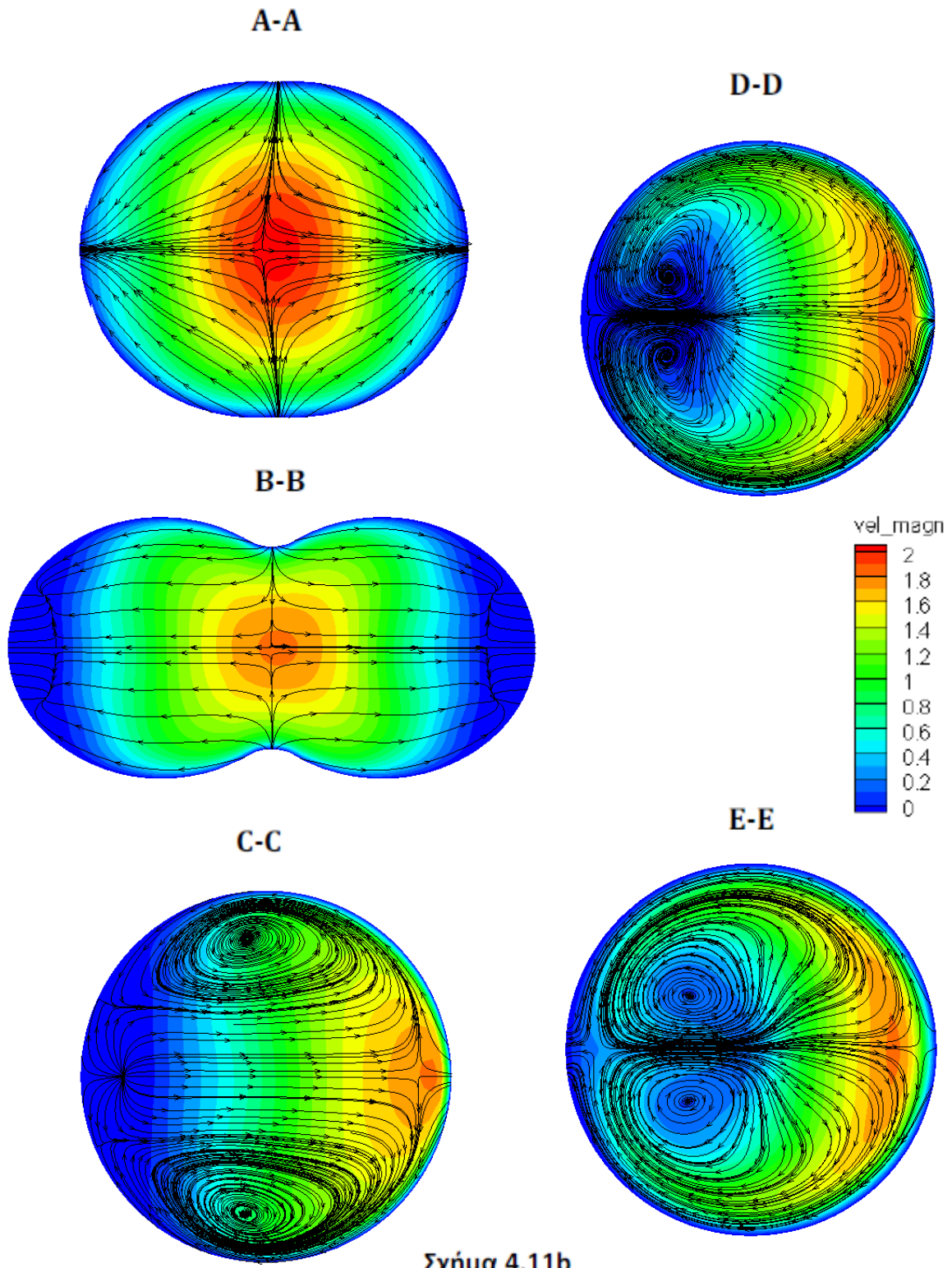
Σχήμα 4.10b

Re = 1788



Σχήμα 4.11a

Re = 1788



Σχήμα 4.11b

Από τα τελευταία σχήματα συμπεραίνουμε ότι για το εύρος  $Re = 1132$  έως  $Re = 1788$  η ροή παρουσιάζει αμελητέες διαφορές, ειδικότερα κατά την κύρια κατεύθυνση. Κατ' αρχήν, παρατηρούμε ότι η ροή είναι συμμετρική ως προς τον άξονα  $y$ , που είναι και ο άξονας συμμετρίας της διακλάδωσης. Έχουμε μια απότομη επιβράδυνση (της τάξης του 50 %) ακριβώς πριν τη διακλάδωση και παρατηρούμε δύο ζώνες μεγάλης ταχύτητας στα εσωτερικά τοιχώματα. Ακριβώς στο σημείο που ξεκινούν οι θυγατρικοί αγωγοί και στην εξωτερική πλευρά δημιουργούνται περιοχές αυξημένης στροβιλότητας, με δίνες που όπως φαίνεται αυξάνονται ελαφρώς όταν αυξάνεται ο  $Re$ , αλλά σε κάθε περίπτωση εκτείνονται μέχρι την έξοδο από τη διακλάδωση. Σχετικά με τη δευτερεύουσα ροή στις διατομές που έχουμε επιλέξει ενδεικτικά, βλέπουμε τη δημιουργία αρχικά δύο δινών που βρίσκονται αντικριστά στο πάνω και κάτω μέρος της διατομής, και που μετατοπίζονται κατά μήκος των αγωγών προς το κέντρο της διατομής. Όπως φαίνεται και από τα διανύσματα της ταχύτητας, η ροή που εξέρχεται από τη διακλάδωση είναι «λοξού» προφίλ, με μετατοπισμένη τη ζώνη μεγάλων ταχυτήτων προς το εσωτερικό. Αυτό, όπως έχουν δείξει μελέτες, επηρεάζει άμεσα τη συμπεριφορά της ρευστού και των σωματιδίων στις διακλαδώσεις που ακολουθούν, αυτό όμως είναι θέμα με το οποίο δεν θα ασχοληθούμε περαιτέρω.

Συγκρίνοντας με τις περιπτώσεις των ασύμμετρων διακλαδώσεων στο προηγούμενο κεφάλαιο, εντοπίζουμε τη βασική διαφορά στο ότι στη συμμετρική διακλάδωση, μια ευρεία ζώνη της κύριας ροής συναντάει το τοίχωμα της διακλάδωσης (carinal ridge), και μάλιστα στην περίπτωση του ανεπτυγμένου προφίλ, η ζώνη αυτή περιέχει και τις μεγαλύτερες ταχύτητες. Αυτό το γεγονός έχει άμεση επίδραση στην επικάθηση των σωματιδίων, κυρίως λόγω αδράνειας όπως θα δούμε παρακάτω, και στο πόσο αυτή μεταβάλλεται με τις συνθήκες ροής. Περιμένουμε μεγάλο αριθμό σωματιδίων να συγκρούονται με το τοίχωμα στην περιοχή αυτή, αφού αποκλίνουν από τις γραμμές ροής, πράγμα που έχει δύο βασικά αποτελέσματα: Πρώτον, το μεγαλύτερο μέρος της συνολικής εναπόθεσης να βρίσκεται στο carinal ridge και δεύτερον, αυτή η εναπόθεση να μην μεταβάλλεται σημαντικά για διάφορες παραμέτρους γεωμετρίας, ροής κτλ. Ακολουθούν τα αποτελέσματα για τα σωματίδια αμέσως μετά.



## 5 Αποτελέσματα σωματιδίων

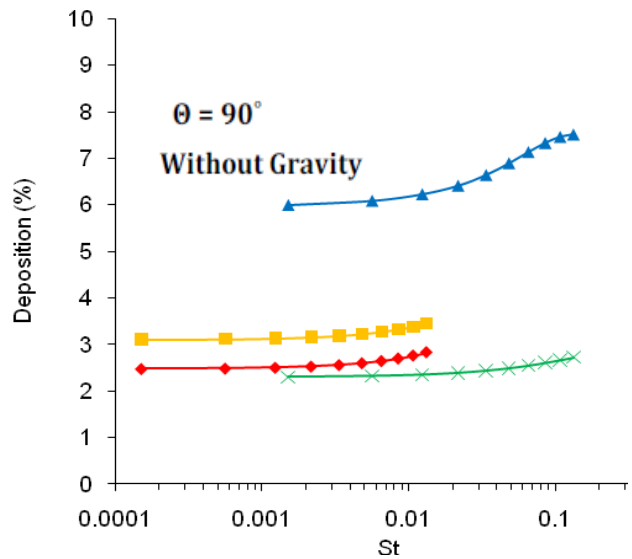
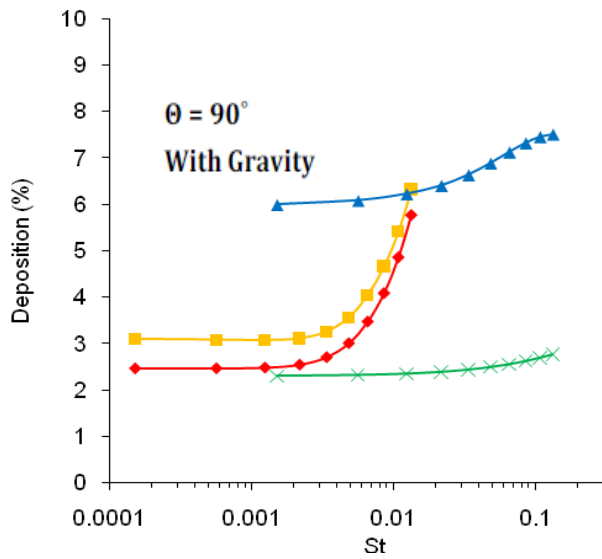
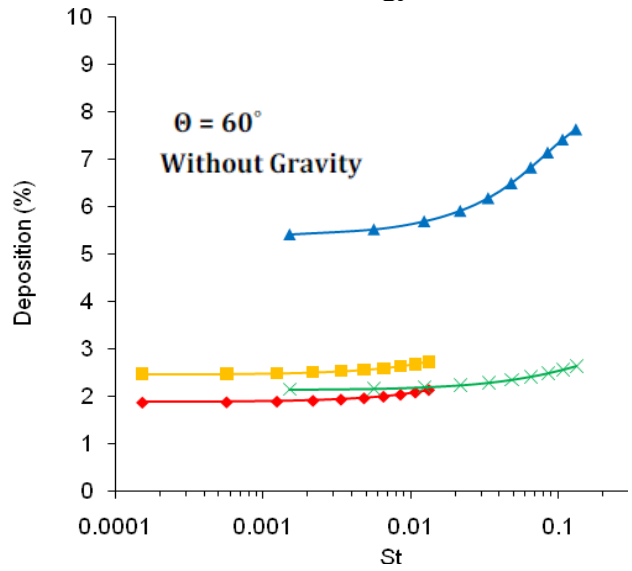
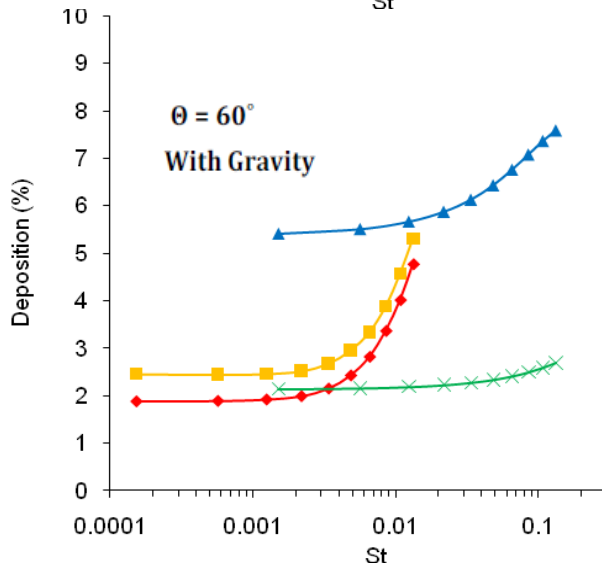
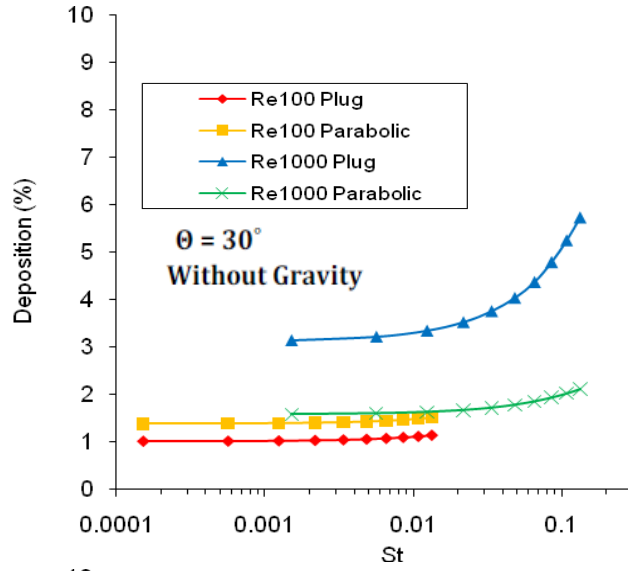
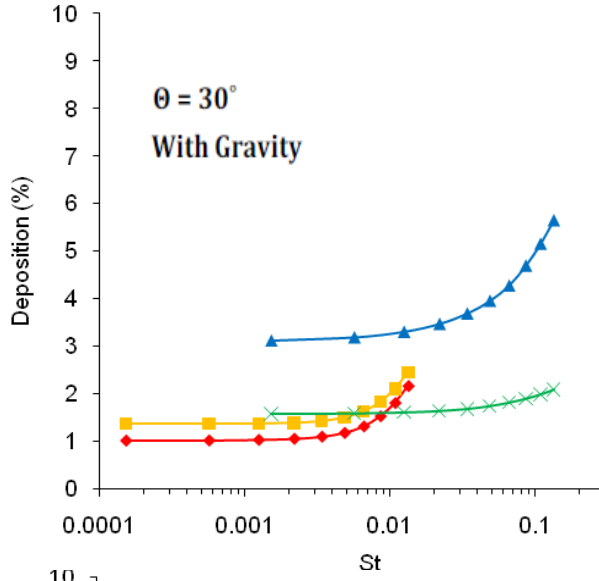
Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα για τα σωματίδια. Όπως αναφέρθηκε και σε προηγούμενο κεφάλαιο, το μοντέλο χρησιμοποιεί το ήδη υπολογισμένο πεδίο ταχυτήτων για να υπολογίσει τη συγκέντρωση των σωματιδίων σε όλους τους υπολογιστικούς όγκους του υπολογιστικού χωρίου και παράλληλα υπολογίζει τη συνολική εναπόθεση. Στη συνέχεια, μέσω της διαδικασίας που περιγράψαμε στο κεφάλαιο 3.4.3, υπολογίζουμε την τοπική εναπόθεση κατά μήκος του αγωγού. Παρακάτω θα παρατεθούν διαγράμματα ολικής και τοπικής εναπόθεσης για διάφορες περιπτώσεις, καθώς και σχήματα όπου φαίνεται η κατανομή συγκέντρωσης σε συγκεκριμένα επίπεδα αλλά και η θέση εναπόθεσης στα τοιχώματα των αγωγών.

Για να είναι δυνατή η όσο πιο ορθή σύγκριση, για όλες τις περιπτώσεις χρησιμοποιήθηκαν οι ίδιες παράμετροι για τα σωματίδια:

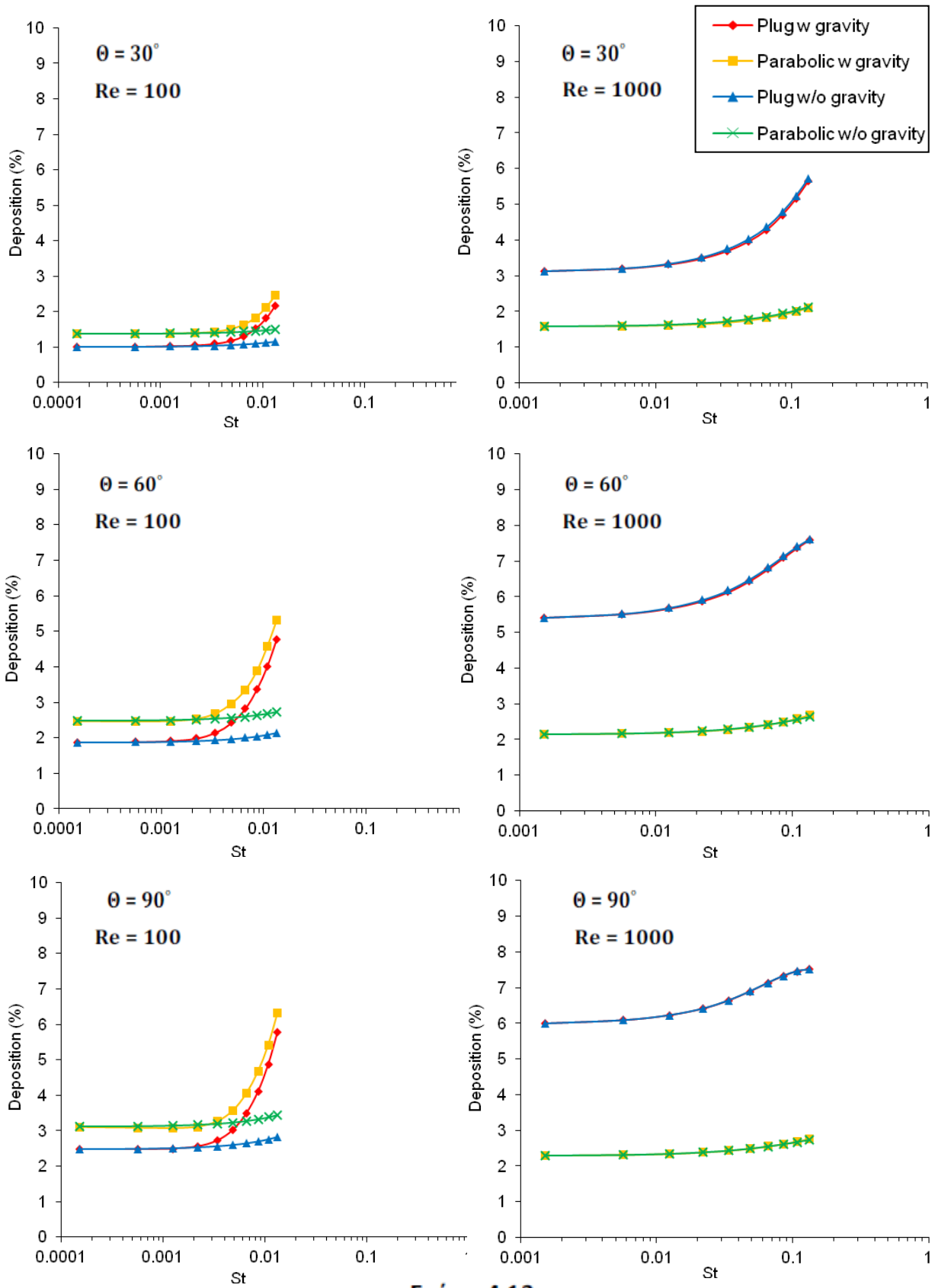
- $d_p = 1\mu m \div 10\mu m$
- $\rho_p = 891 \frac{kg}{m^3}$
- Βαρύτητα (όταν λαμβάνεται υπόψιν) παράλληλη στο επίπεδο συμμετρίας της διακλάδωσης
- Η αδράνεια συμπεριλήφθηκε στο μοντέλο σε όλες τις περιπτώσεις, αφού είναι σημαντική για σωματίδια τέτοιου μεγέθους
- $St = \frac{\rho_p d_p^2 u_m}{18\mu D_{tube}}$ , όπου  $D_{tube}$  η υδραυλική διάμετρος

### 5.1 Ασύμμετρες διακλαδώσεις

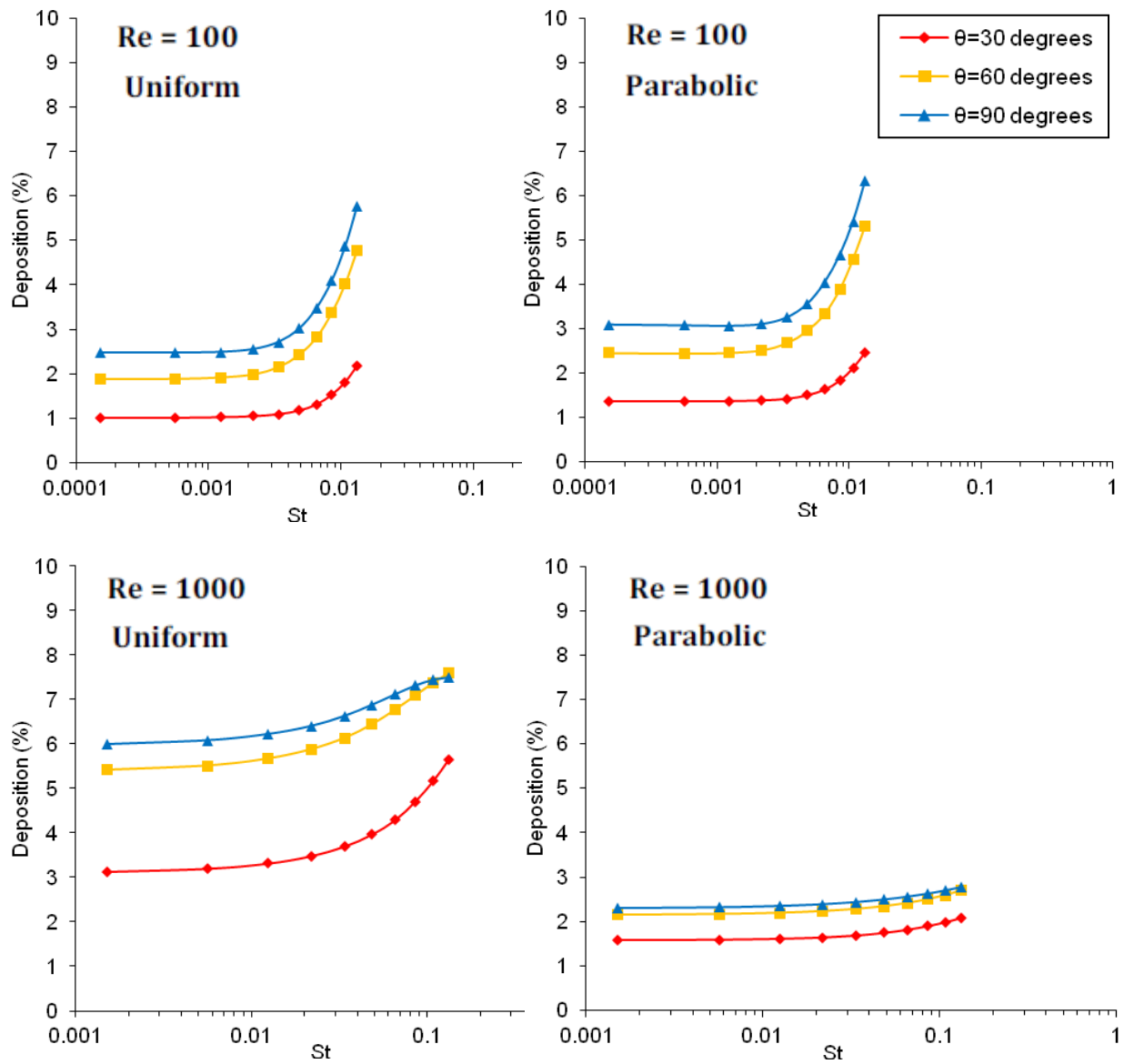
Για τις ασύμμετρες διακλαδώσεις μελετήθηκαν αρκετές παράμετροι, όπως η γωνία διακλάδωσης, ο *Reynolds*, η συνεισφορά ή όχι της βαρύτητας και το μέγεθος του σωματιδίου. Παραθέτουμε ενδεικτικά κάποια διαγράμματα της ολικής εναπόθεσης συναρτήσει του αδιάστατου αριθμού Stokes (σχήμα [4.12]), την επίδραση της βαρύτητας (σχήμα [4.13]), την επίδραση της γωνίας διακλάδωσης (σχήμα [4.14]), της τοπικής εναπόθεσης για δύο περιπτώσεις *Re* και δύο διαμέτρους σωματιδίων, καθώς και σχήματα όπου φαίνονται τα σημεία εναπόθεσης για δύο *Re* σε χαμηλό και υψηλό Stokes.





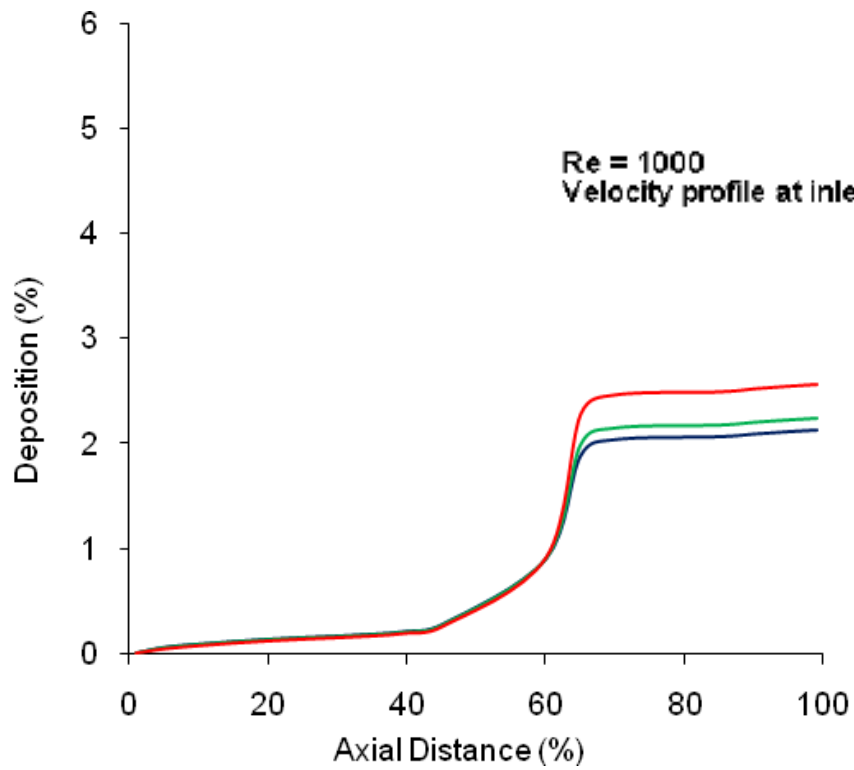
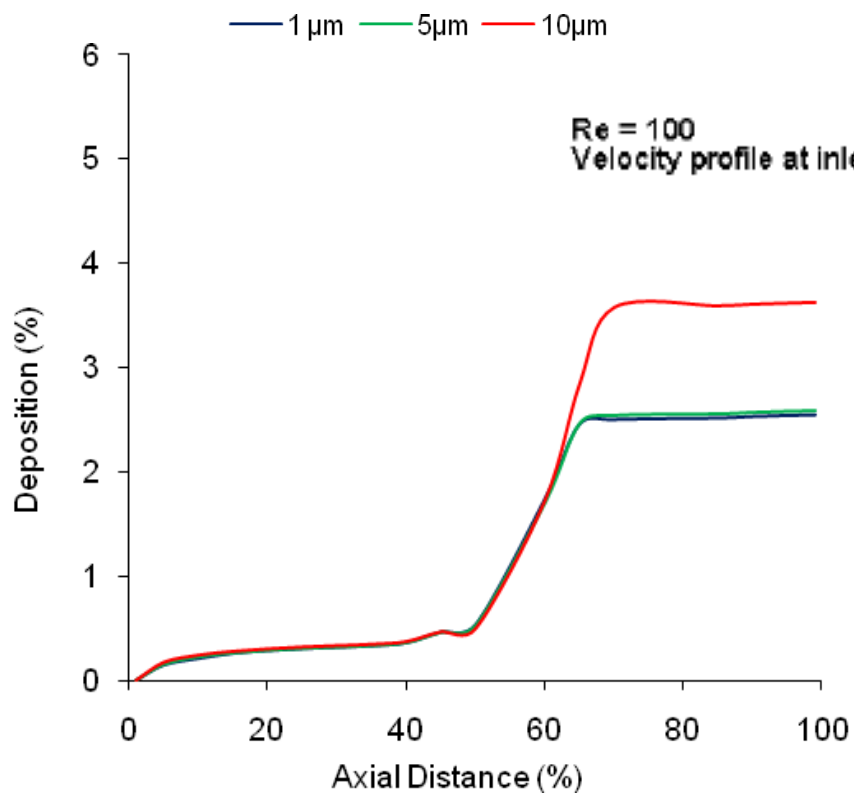


Σχήμα 4.13



Σχήμα 4.14

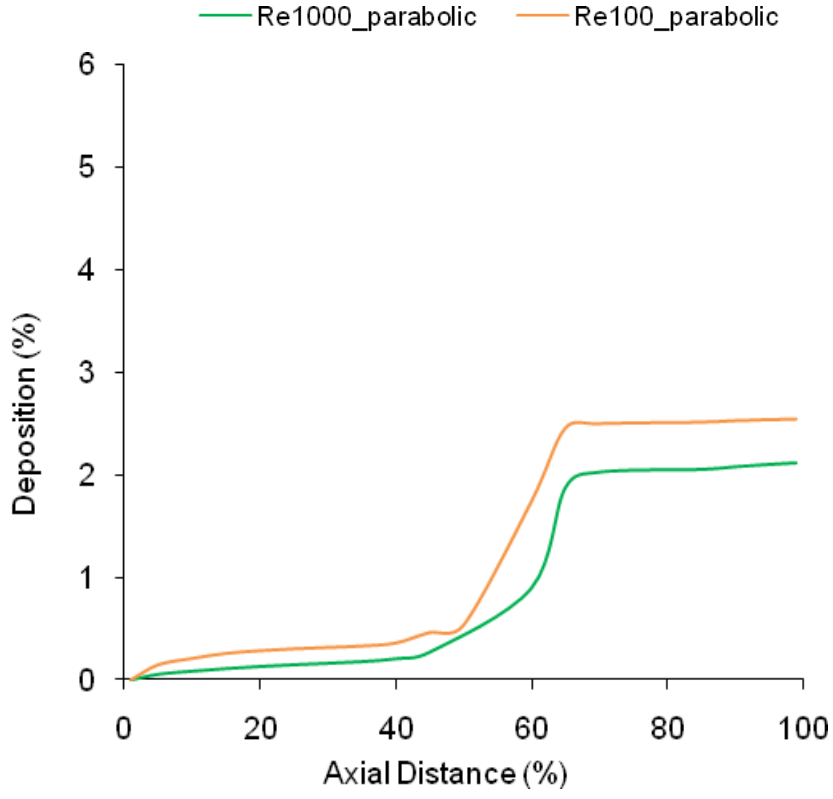
$\theta = 60^\circ$   
With Gravity



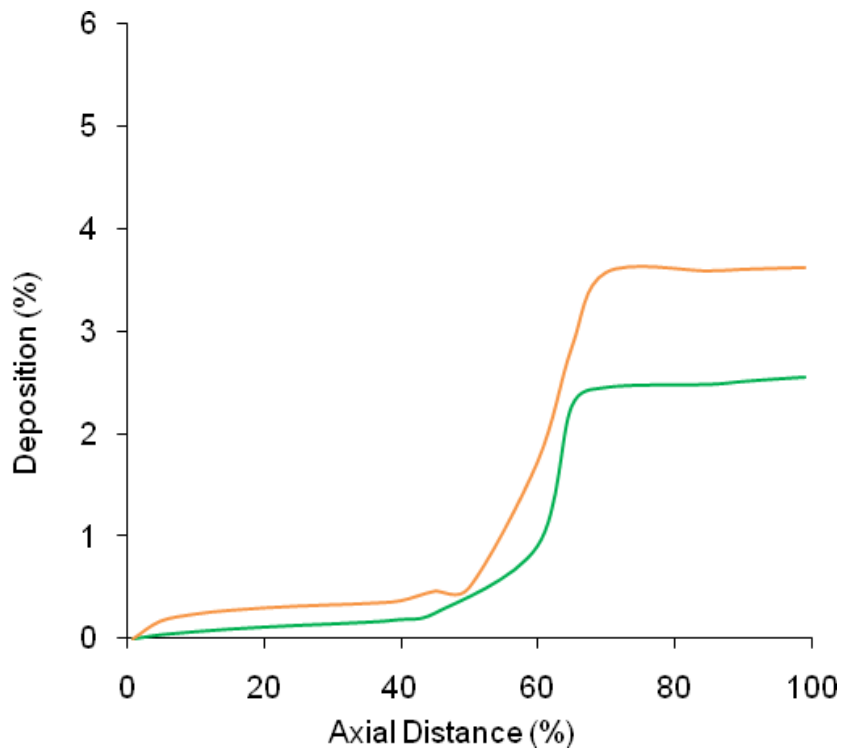
Σχήμα 4.15a

$\theta = 60^\circ$   
With Gravity

1  $\mu\text{m}$

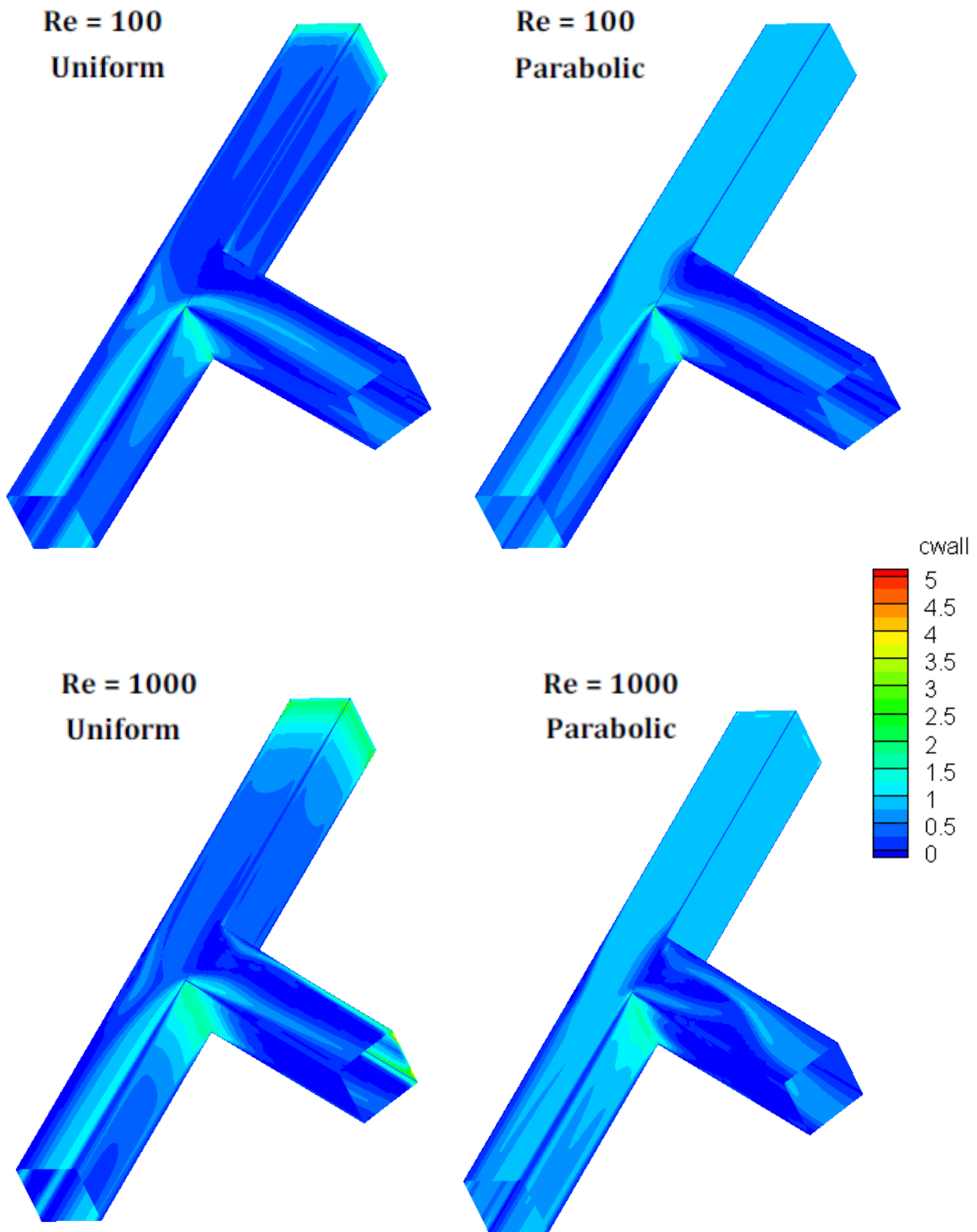


10  $\mu\text{m}$



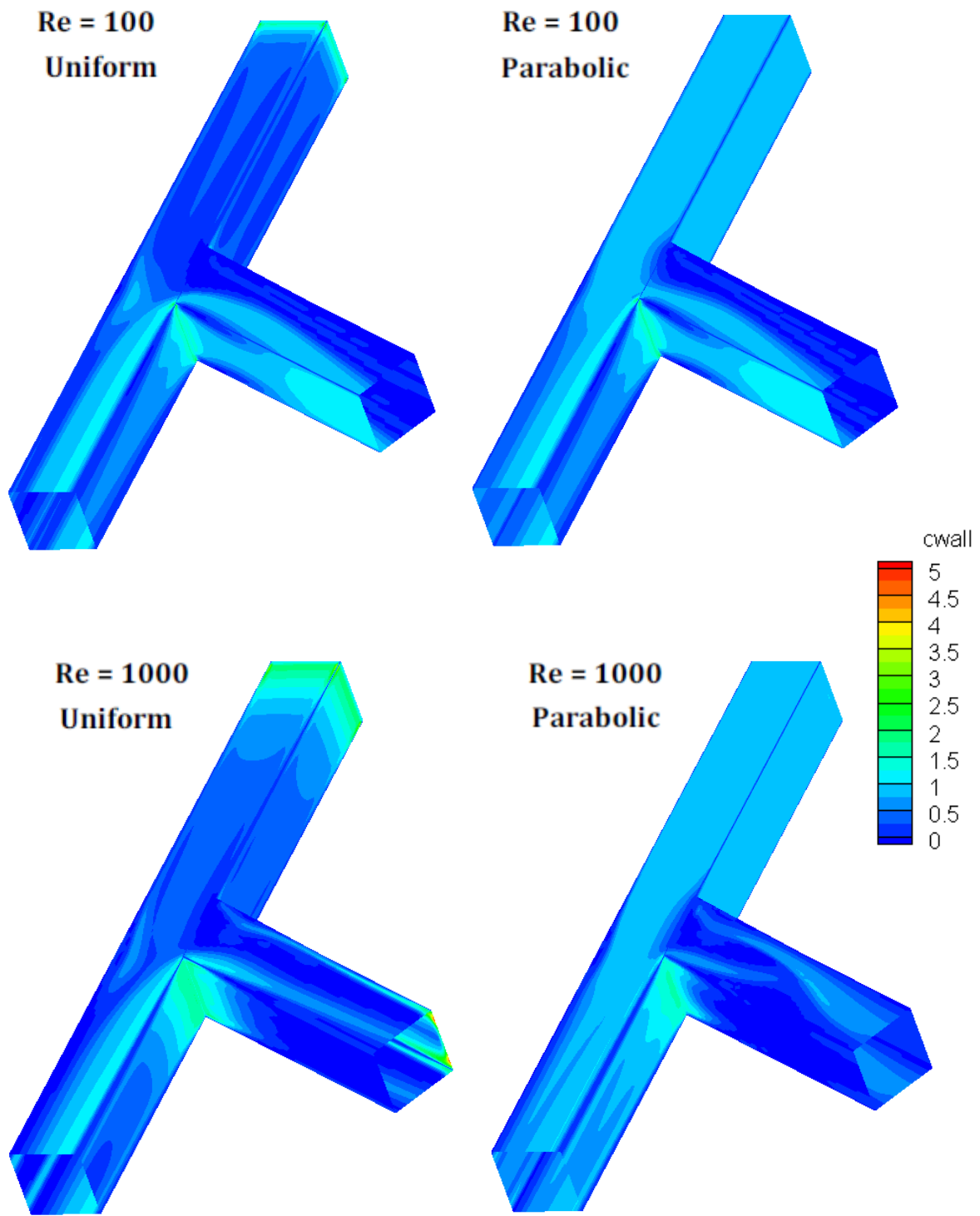
Σχήμα 4.15b

$St = 0.001$



Σχήμα 4.16a

$St = 0.01$



Σχήμα 4.16b

Από το σχήμα [4.12] μπορούμε να εξάγουμε κάποια πολύ χρήσιμα συμπεράσματα. Κατ'αρχήν, παρατηρούμε ότι για όλες τις συνθήκες ροής, η εναπόθεση είναι μικρότερη του 10%. Αυξάνοντας τη γωνία της διακλάδωσης (βλ. και σχήμα [4.14]) αυξάνεται και η συνολική εναπόθεση αν και για υψηλό  $Re$ , η διαφορά για γωνίες πάνω από  $60^\circ$  είναι μικρές. Για  $Re=100$  η εναπόθεση για τα δύο προφίλ ταχύτητας εισόδου διαφέρουν ελάχιστα, με το παραβολικό να είναι λίγο μεγαλύτερο, γεγονός που προβλέψαμε και από το πεδία ροής που ήταν σχεδόν όμοια. Για  $Re=1000$  σημειώνουμε ότι με ομοιόμορφο προφίλ η εναπόθεση είναι πολύ μεγαλύτερη ενώ αντίθετα για παραβολικό μικρότερη σχετικά με όλες τις περιπτώσεις. Και αυτό είναι αναμενόμενο όπως ήδη αναφέρθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, αφού για ομοιόμορφο προφίλ έχουμε μια δέσμη μεγάλης ταχύτητας που εισέρχεται στο θυγατρικό αγωγό και επιπλέον σημαντικές ταχύτητες κοντά στα τοιχώματα ακριβώς μετά την είσοδο. Αντίθετα, το παραβολικό προφίλ, όντας ήδη ανεπτυγμένο, σχεδόν δεν εισέρχεται στο θυγατρικό αγωγό.

Σχετικά με την επίδραση της βαρύτητας (σχήμα [4.13]), παρατηρούμε ότι για  $Re=100$  γίνεται σημαντική για σωματίδια διαμέτρου άνω των  $6\ \mu\text{m}$ , ενώ για  $Re=1000$  η συνεισφορά της στη συνολική εναπόθεση κρίνεται αμελητέα. Αυτό οφείλεται στο ότι για μεγάλα  $Re$  οι δυνάμεις αδράνειας γίνονται πολύ σημαντικές σε σχέση με τους υπόλοιπους μηχανισμούς.

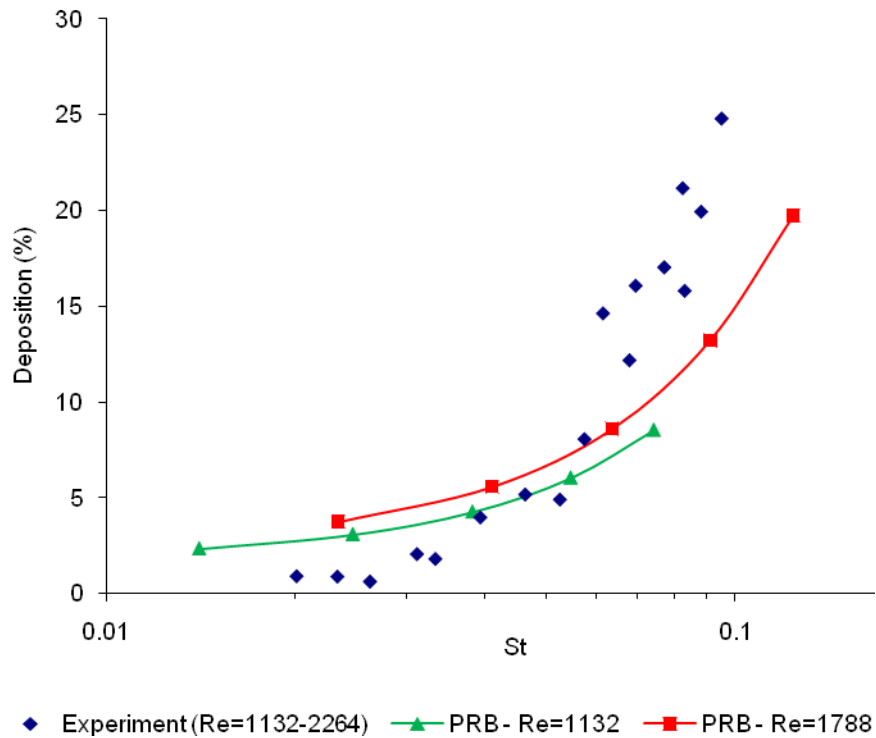
Στο σχήμα [4.15a] βλέπουμε την τοπική εναπόθεση κατά μήκος του αγωγού για τρία διαφορετικά μεγέθη σωματιδίων. Όπως είναι αναμενόμενο, όσο μεγαλώνει η διάμετρος αυξάνεται και η εναπόθεση. Παρατηρώντας τη μορφή των καμπύλων (και για το σχήμα [4.15b]), συμπεραίνουμε ότι η εναπόθεση λαμβάνει χώρα κυρίως στη μικρή περιοχή της διακλάδωσης ενώ είναι αμελητέα για το πρώτο και τελευταίο τμήμα του αγωγού. Αυτό επιβεβαιώνουν αρκετές πειραματικές και υπολογιστικές μελέτες (ενδεικτικά το πείραμα των Kim et al. (1993), με το οποίο και θα γίνει σύγκριση στη συνέχεια). Το ίδιο μπορούμε να συμπεράνουμε και από τα σχήματα [4.16a] και [4.16b], όπου φαίνεται η περιοχή αυξημένης εναπόθεσης στο *carinal ridge*, όπου και η ροή παρουσιάζει τις μεγαλύτερες κλίσεις. Στα τελευταία σχήματα βλέπουμε και τη διαφορά μεταξύ του ομοιόμορφου με το παραβολικό προφίλ στην περιοχή αμέσως μετά την είσοδο, όπου για το ομοιόμορφο, λόγω μεγαλύτερων ταχυτήτων και εμφάνιση δευτερευουσών ροών κατά την ανάπτυξη του, έχουμε τοπικά εναπόθεση σωματιδίων, η οποία και αυξάνεται όσο μεγαλώνει ο  $Re$ .

## 5.2 Συμμετρικές διακλαδώσεις – Σύγκριση με πειραματικά δεδομένα

Για τις δύο περιπτώσεις συμμετρικής διακλάδωσης (τετραγωνικής και κυκλικής διατομής) παραθέτουμε αντίστοιχα διαγράμματα και σχήματα. Τόσο οι συνθήκες ροής όσο και οι παράμετροι σωματιδίων, που δόθηκαν στην αρχή του παρόντος κεφαλαίου, επιλέχθηκαν να είναι ίδιες με αυτές της πειραματικής εργασίας των Kim et al. (1994), ώστε να είναι δυνατή μια σύγκριση με τα αποτελέσματα στα οποία καταλήξαμε με το μοντέλο μας και τυχόν επαλήθευση ή απόρριψή τους. Όπως θα φανεί παρακάτω, το μοντέλο μας πλησιάζει σε αρκετά ικανοποιητικό βαθμό τα πειραματικά δεδομένα, γεγονός που μας εξασφαλίζει ως προς την εγκυρότητα των αποτελεσμάτων μας και για τις υπόλοιπες περιπτώσεις που εξετάστηκαν. Προηγούμενη σύγκριση και επαλήθευση με πειραματικά δεδομένα έχει γίνει στην εργασία των Piloni et al (2011), όπου μελετήθηκε η ροή σωματιδίων σε αγωγό κυκλικής διατομής που υπόκειται σε στροφή 90° (bend).

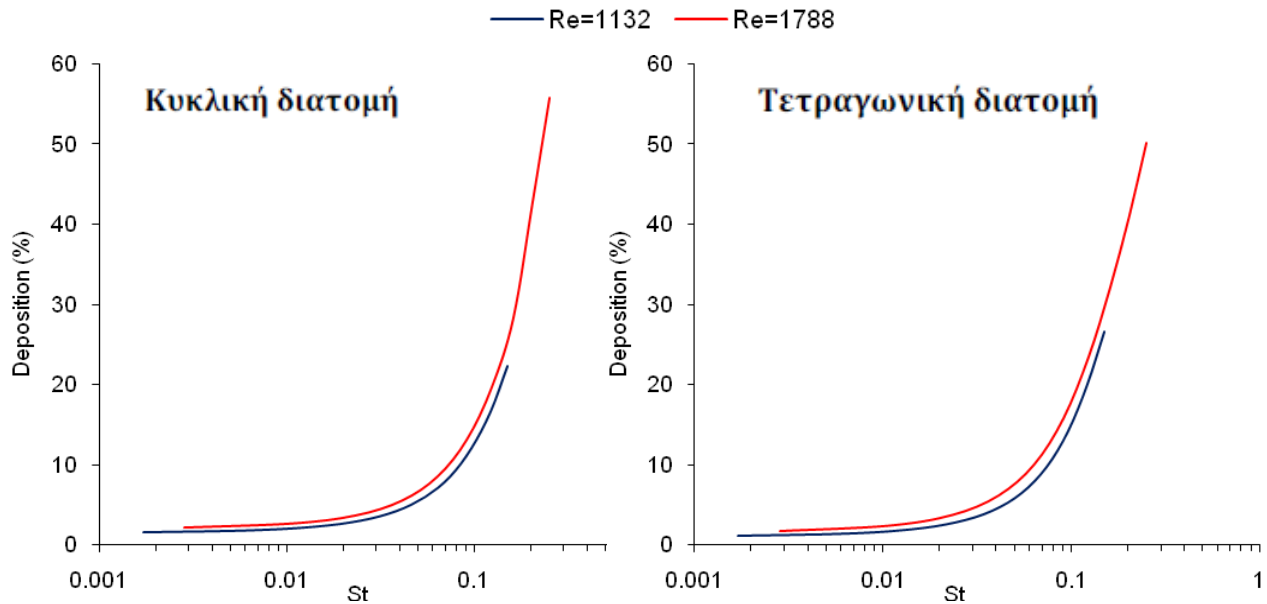
Στην πειραματική εργασία των Kim et al. (1994), διεξάγονται μετρήσεις για σωματίδια διαμέτρων 3, 5 και 7  $\mu\text{m}$  σε εύρος  $Re = 283 \div 3397$ , από τα οποία προκύπτει και  $St = 0.01 \div 0.3$ . Επειδή στο μοντέλο μας δε συμπεριλαμβάνουμε φαινόμενα τύρβης, επιλέξαμε να προσομοιώσουμε ροές για  $Re = 1132$  και  $Re = 1788$ . Ένα από τα κύρια συμπεράσματα του πειράματος είναι ότι η εναπόθεση εξαρτάται σχεδόν αποκλειστικά από τον αριθμό  $St$ , με λουπές παραμέτρους όπως ο  $Re$ , ο λόγος των διαμέτρων και η γωνία διακλάδωσης να έχουν ανεπαίσθητη επίδραση στη συνολική εναπόθεση. Γι'αυτό το λόγο, αναμένουμε να έχουμε συμφωνία αποτελεσμάτων για τους  $Re$  που επιλέξαμε. Επίσης, από το πείραμα προκύπτει ότι ο βασικός μηχανισμός εναπόθεσης είναι η αδρανειακή πρόσκρουση στην περιοχή του *carinal ridge*, γι'αυτό, όπως και πριν, θα παρουσιάσουμε διαγράμματα τοπικής εναπόθεσης και σχήματα ώστε να το επιβεβαιώσουμε. Θα γίνει επίσης μια σύγκριση μεταξύ τετραγωνικής και κυκλικής διατομής.



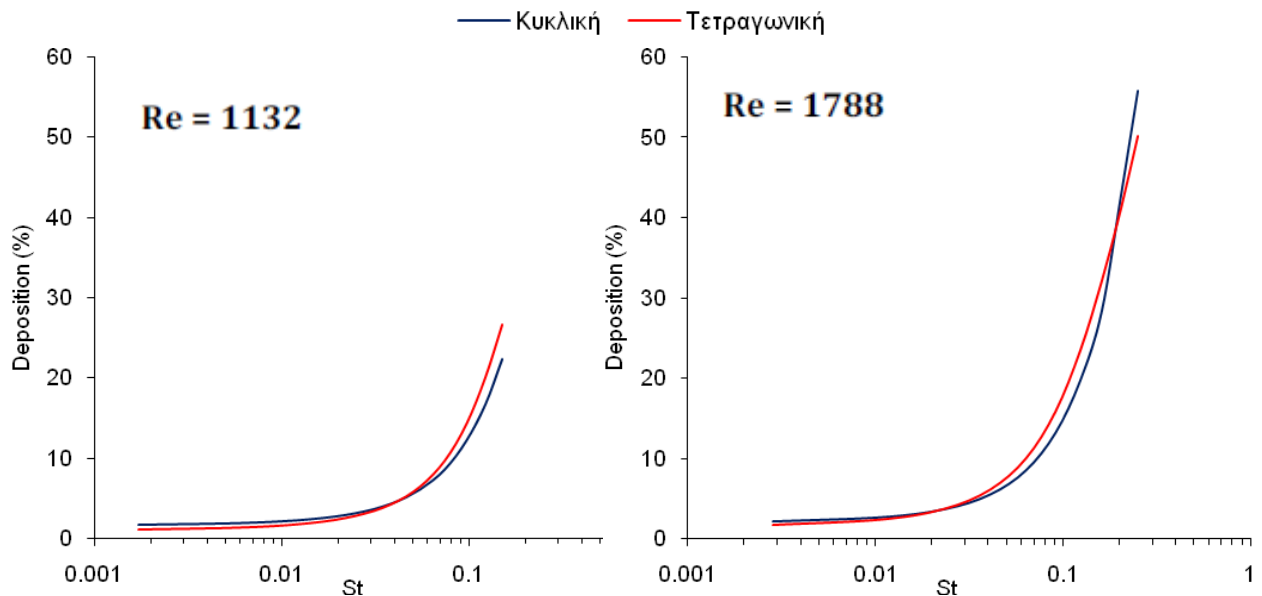


Σχήμα 4.17

Όπως βλέπουμε στο διάγραμμα του σχήματος [4.17], τα πειραματικά δεδομένα προσεγγίζονται ικανοποιητικά για το εύρος του  $St$  που εξετάζουμε. Επιπλέον, δεν παρατηρούμε σημαντική διαφορά μεταξύ των δύο  $Re$ , όπως ακριβώς και στο πείραμα. Ακολουθούν διαγράμματα για όλο το εύρος της διαμέτρου (1 έως 10  $\mu m$ ).

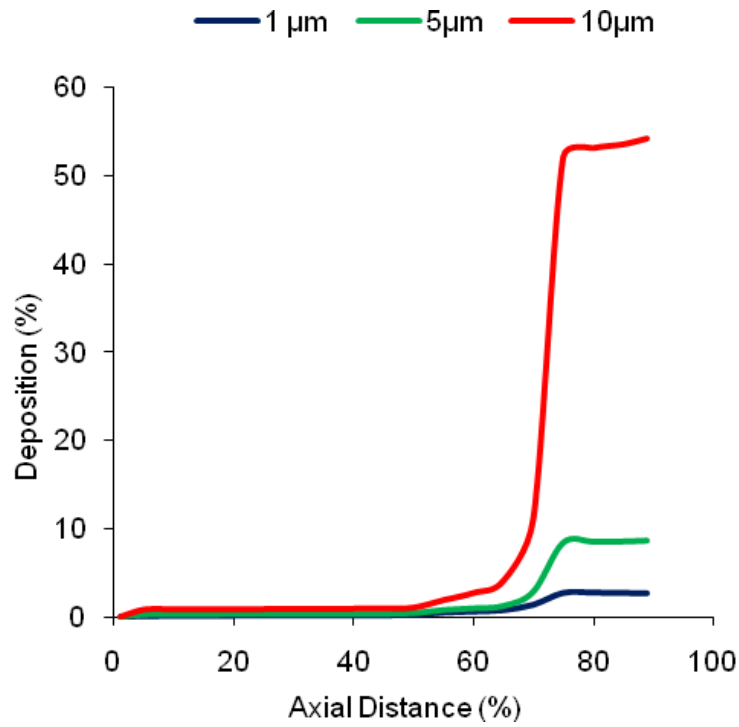


Σχήμα 12.

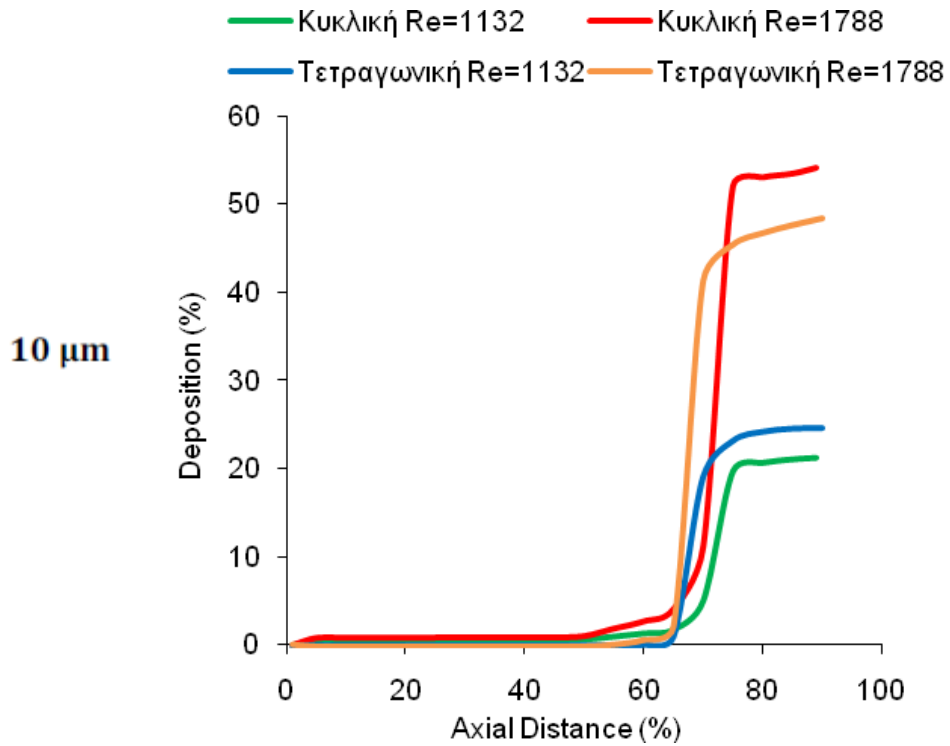


Σχήμα 4.18

Όπως βλέπουμε στα παραπάνω διαγράμματα, επιβεβαιώνεται ότι ο  $Re$  δεν είναι σημαντικός παράγοντας όσο αναφορά τη συνολική εναπόθεση για τις περιπτώσεις που εξετάζουμε. Αμελητέα σημασία φαίνεται να έχει και το σχήμα της διατομής και του carinal ridge (καμπύλο ή οξεία γωνία). Ακολουθούν διαγράμματα τοπικής εναπόθεσης (σχήματα [4.19] και [4.20]) και σχήματα που φαίνονται οι περιοχές εναπόθεσης.

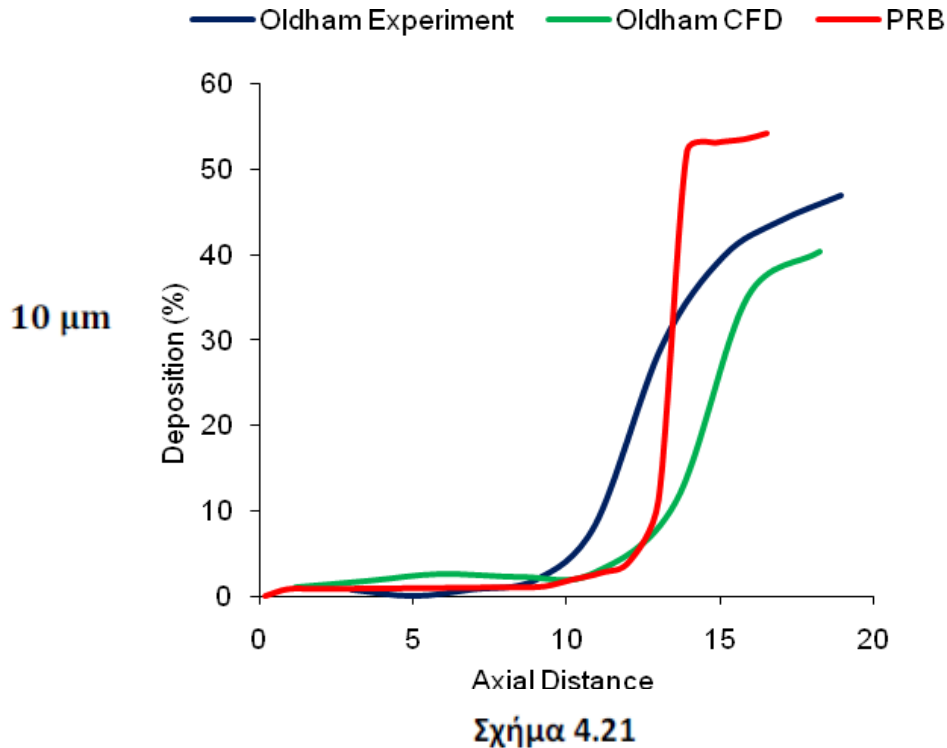


Σχήμα 4.19



Σχήμα 4.20

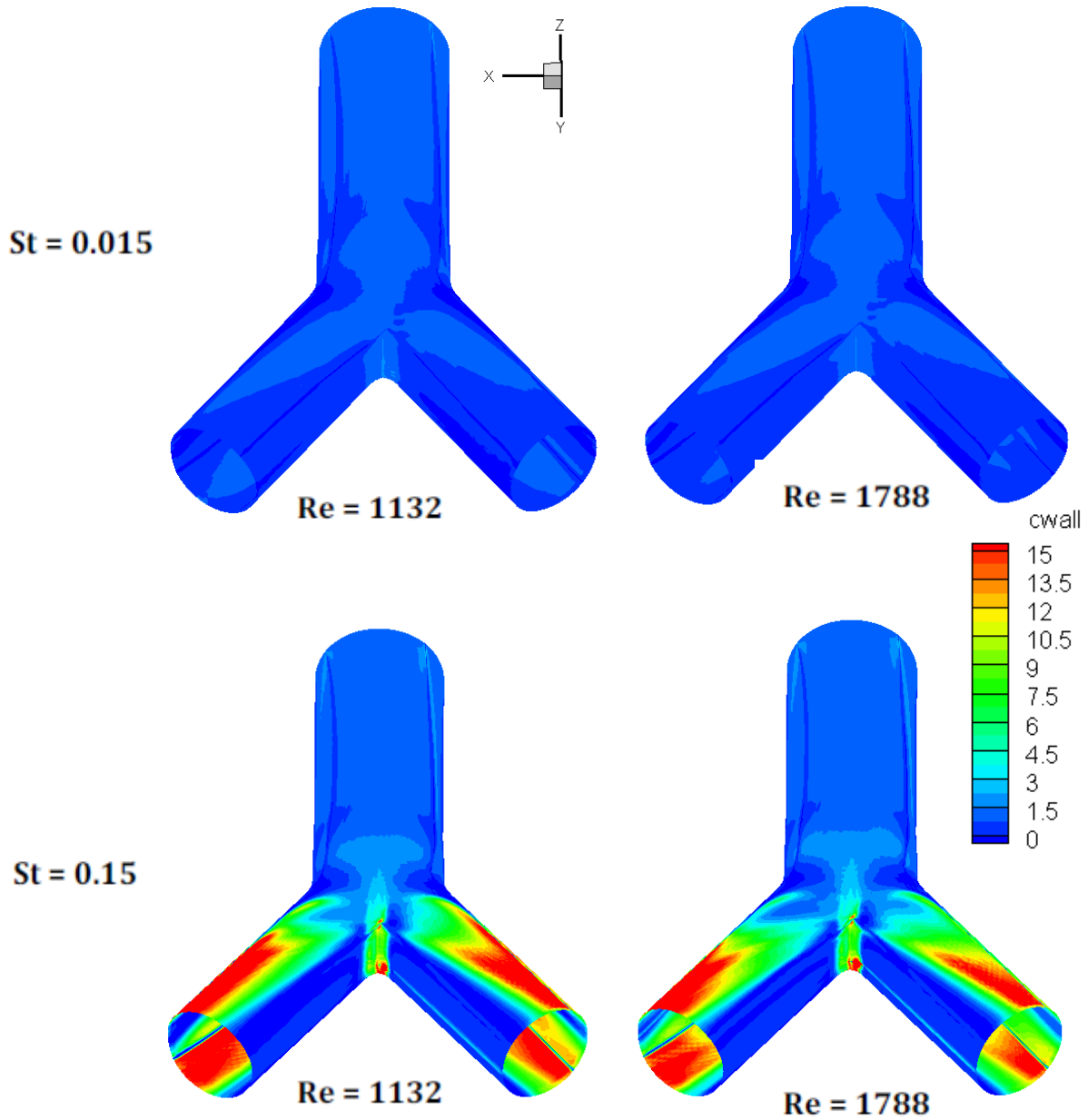
Σε αυτό το σημείο παραθέτουμε και μια σύγκριση με την πειραματική εργασία των Oldham et al (2000), οι οποίοι έκαναν μετρήσεις και προσομοιώσεις σε διπλή διακλάδωση ίδιας γεωμετρίας και συνθηκών ροής για σωματίδια διαμέτρου 10 μm. Περιοριζόμαστε στα αποτελέσματα για την πρώτη διακλάδωση, και όπως φαίνεται στο σχήμα [4.21], οι καμπύλες για την τοπική εναπόθεση κατά μήκος του αγωγού παρουσιάζουν μικρή απόκλιση.



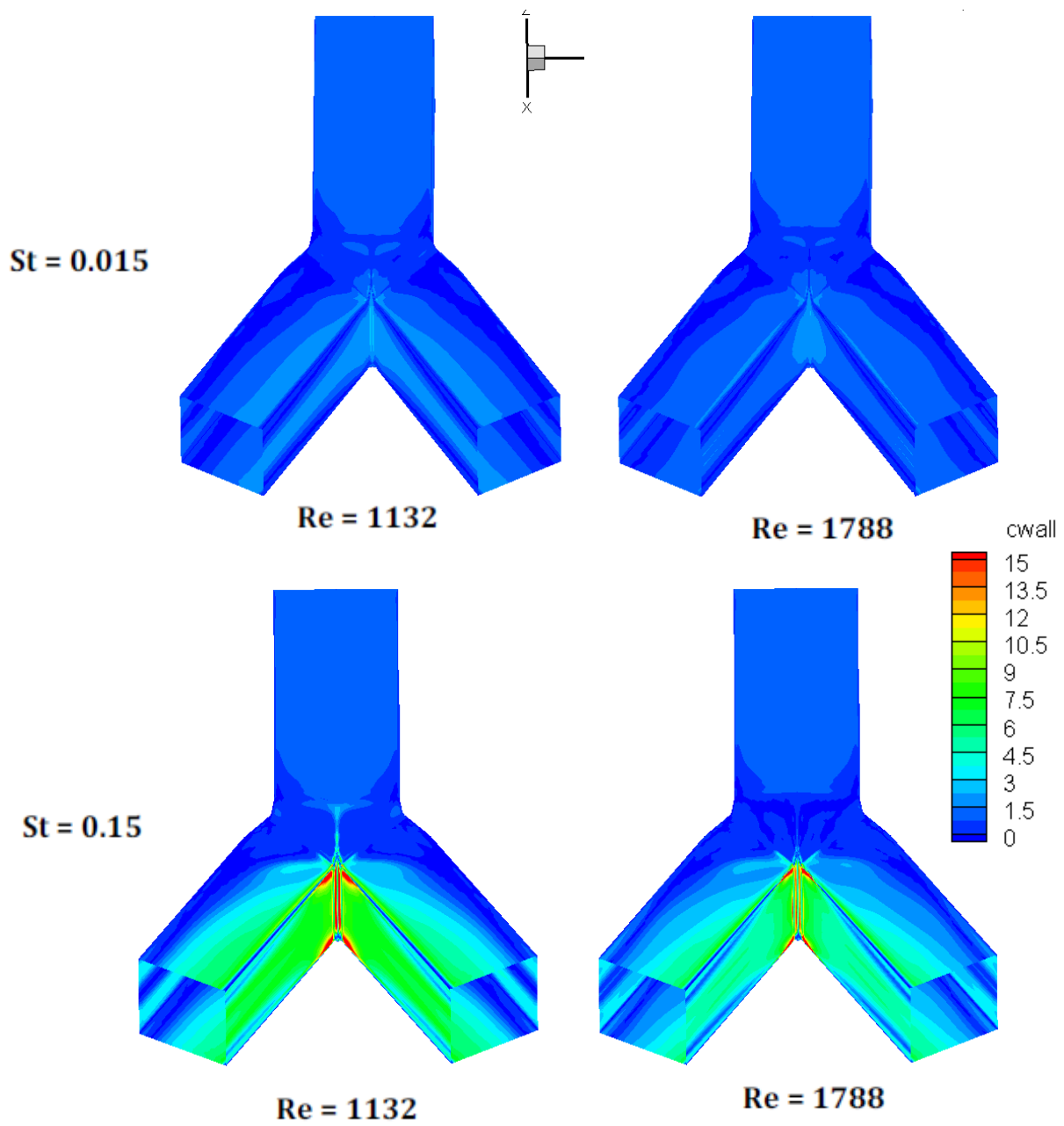
Είναι φανερό (σχήματα [4.19], [4.20], [4.21]) ότι τα αποτελέσματα είναι αντίστοιχα με αυτά για τις ασύμμετρες διακλαδώσεις, δηλαδή όσο αυξάνει το μέγεθος του σωματιδίου αυξάνει και η εναπόθεση, ενώ το μεγαλύτερο ποσοστό της παρουσιάζεται τοπικά στο carinal ridge της διακλάδωσης. Αξίζει να σημειωθεί ότι το η ολική εναπόθεση στην περίπτωση της συμμετρικής διακλάδωσης κυμαίνεται από 1 μέχρι περίπου 60 %, αρκετά μεγαλύτερη δηλαδή από τις περιπτώσεις ασύμμετρης διακλάδωσης, όπου δεν ξεπερνάει το 10 %. Αυτό ήταν αναμενόμενο όπως αναφέρθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, αφού μεγάλο ποσοστό των σωματιδίων έρχονται σε επαφή με το τοίχωμα του carinal ridge αποκλίνοντας από τις γραμμές ροής λόγω αδράνειας, αυξάνοντας αρκετά την εναπόθεση.

Τέλος, όσο αναφορά το σχήμα της διατομής και του carinal ridge, στο σχήμα [4.20] βλέπουμε ότι στην περίπτωση της κυκλικής διατομής και καμπύλου carinal ridge η εναπόθεση τοπικά είναι ελαφρώς μικρότερη και εκτείνεται σε λίγο μεγαλύτερη περιοχή. Αυτό οφείλεται

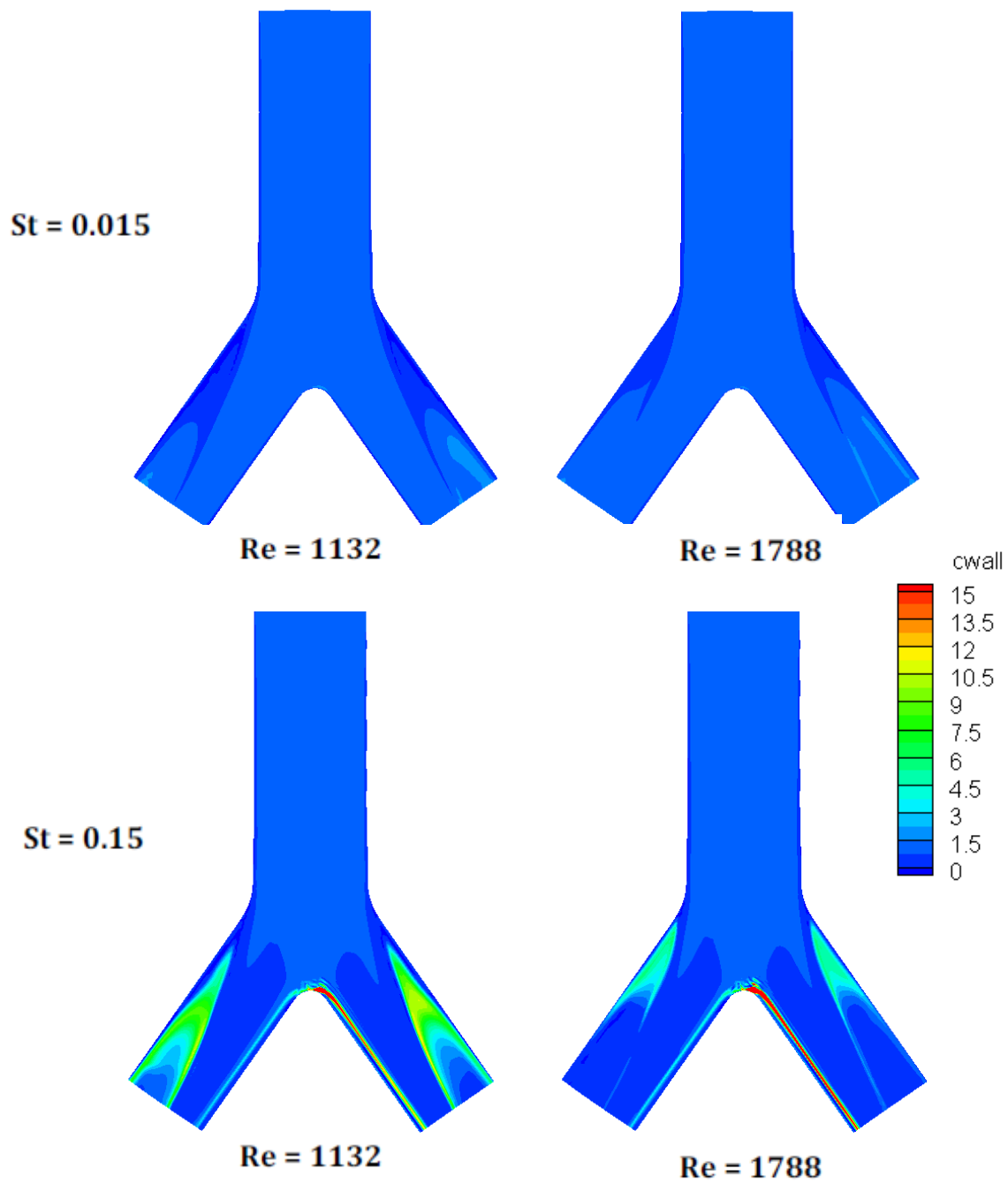
στις μικρότερες κλίσεις ταχύτητας που δημιουργεί η καμπυλότητα του τοιχώματος καθώς και η μεγαλύτερη επιφάνεια αυτού, συγκριτικά με την περίπτωση οξείας γωνίας. Σε κάθε περίπτωση όμως, οι διαφορές δεν είναι τόσο σημαντικές. Ακολουθούν τα σχήματα [4.22a]-[4.22d] με την εναπόθεση στα τοιχώματα για μικρό και μεγάλο Stokes για τους  $Re$  που εξετάσαμε στην διακλάδωση κυκλικής και τετραγωνικής διατομής.



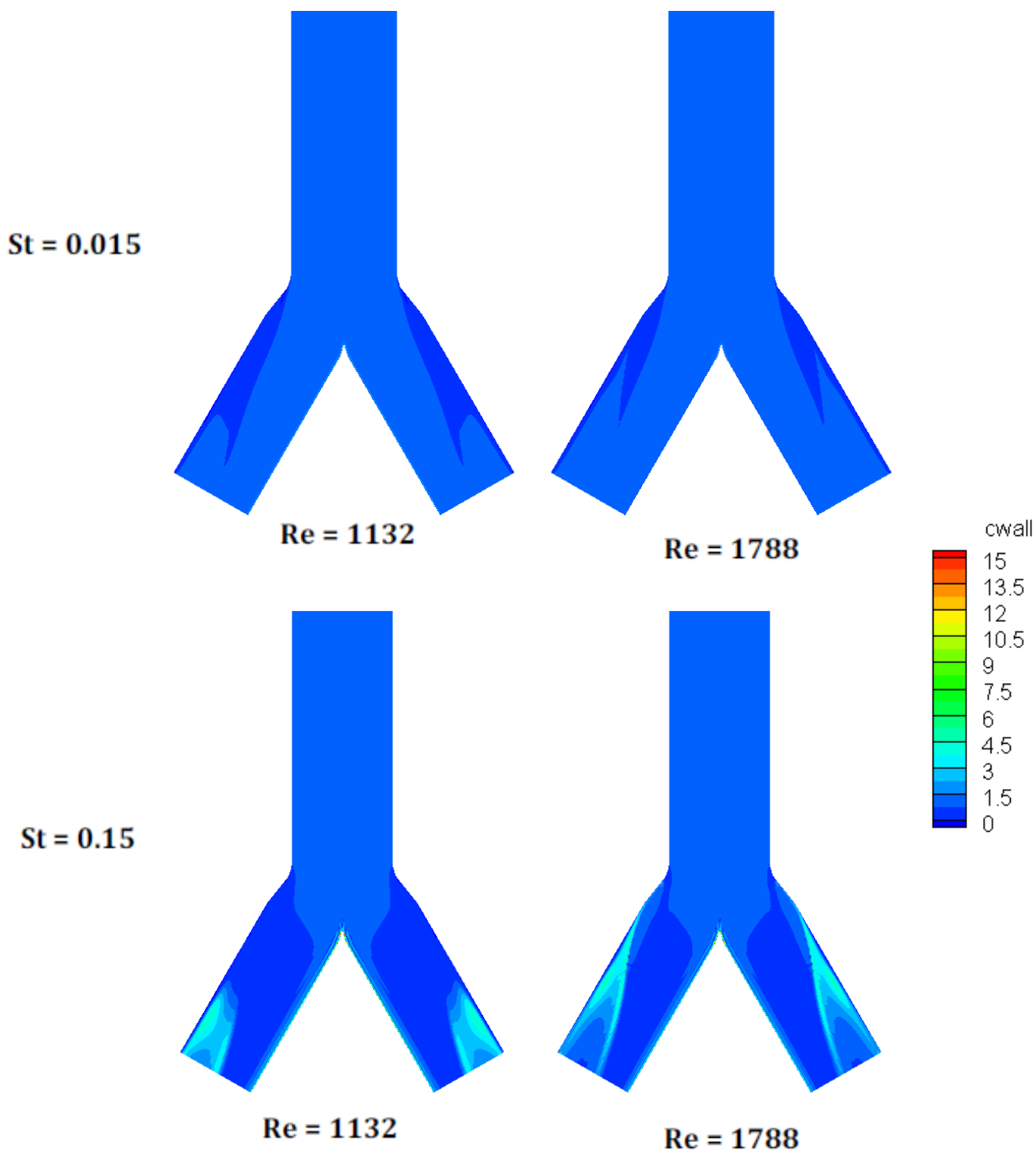
Σχήμα 4.22a



Σχήμα 4.22b



Σχήμα 4.22c



Σχήμα 4.22d



Στα σχήματα [4.22] βλέπουμε ότι ο παράγοντας που έχει τη μεγαλύτερη επίδραση είναι ο αδιάστατος αριθμός Stokes. Φαίνεται καθαρά η αυξημένη τοπική εναπόθεση στο carinal ridge των διακλαδώσεων. Πέρα από αυτή τη σημαντική περιοχή, παρατηρούμε αυξημένη συγκέντρωση και εναπόθεση στην εσωτερική περιοχή αμέσως μετά τη διακλάδωση καθώς και στα άνω και κάτω τοιχώματα. Αυξημένη συγκέντρωση παρουσιάζεται και στο εσωτερικό των θυγατρικών αγωγών, στις περιοχές που έχουμε ανακυκλοφορία της ροής και δίνες.

Σχετικά με το σχήμα της διατομής, βλέπουμε ότι στην περίπτωση της κυκλικής διατομής, όπου η μετάβαση από τη μεγάλη διατομή του κύριου αγωγού στη μικρή των θυγατρικών γίνεται ομαλά, η εναπόθεση εκτείνεται τοπικά σε μεγαλύτερη επιφάνεια και έχει μικρότερες τιμές. Αντίθετα, στην τετραγωνική διατομή όπου και αυτή η μετάβαση είναι απότομη παρατηρείται αυξημένη επικάθηση μόνο στο τελευταίο κομμάτι. Επίσης, για κυκλική διατομή παρατηρούμε σημαντική εναπόθεση στο ανώτερο και κατώτερο τμήμα των θυγατρικών αγωγών, όπου στο πεδίο ροής σχηματίζονται δύο ισχυρές δίνες αντίστοιχα. Τέλος, βλέπουμε ότι στη διακλάδωση κυκλικής διατομής, υπάρχει μια λεπτή ζώνη μεγάλης συγκέντρωσης ακριβώς πριν τα τοιχώματα στο εσωτερικό κομμάτι αμέσως μετά το carinal ridge, οπότε και παρατηρείται μειωμένη επικάθηση σε σχέση με τη διακλάδωση τετραγωνικής διατομής.



## 6 Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία προσομοιώθηκε σε Η/Υ η ροή αερολύματος σε διακλαδώσεις διαφόρων γεωμετριών (συμμετρικές G3-G4– ασύμμετρες, διαφόρων γωνιών και διατομών) και για διάφορες συνθήκες ροής (αριθμούς  $Re$  και προφίλ ταχύτητας στην είσοδο). Σχετικά με τα σωματίδια, εξετάστηκε η επίδραση που έχουν παράμετροι όπως ο αδιάστατος αριθμός Stokes, η βαρυτική έλξη και η αδράνεια στη συνολική και τοπική εναπόθεση στους αγωγούς αυτούς και τα αποτελέσματα επιβεβαιώθηκαν με πειραματικά δεδομένα που βρέθηκαν στη βιβλιογραφία.

Όπως αναφέρθηκε και λεπτομερώς στα προηγούμενα κεφάλαια, η εναπόθεση για τις συμμετρικές διακλαδώσεις φαίνεται να είναι σχεδόν αποκλειστικά συνάρτηση του αριθμού Stokes, ο οποίος για σταθερές συνθήκες ροής και γεωμετρίας εξαρτάται μόνο από τη διάμετρο των σωματιδίων. Αυτό συμβαίνει διότι ο επικρατέστερος μηχανισμός εναπόθεσης για σωματίδια διαμέτρου μεγαλύτερης του  $1 \mu\text{m}$  είναι η αδρανειακή πρόσκρουση, κατά της οποίας τα σωματίδια αποκλίνουν από τις γραμμές ροής του ρευστού και συγκρούονται με τα τοιχώματα, όπου και επικάθονται. Στις συμμετρικές διακλαδώσεις που εξετάσαμε, η σύγκρουση αυτή είναι αναπόφευκτη λόγω τόσο της θέσης του τοιχώματος ακριβώς στη θέση της διακλάδωσης (carinal ridge) όπου οι ροή χωρίζεται σε δύο ρεύματα που προχωρούν στους θυγατρικούς αγωγούς, όσο και λόγω του προφίλ ταχύτητας στην είσοδο. Αυτό είναι παραβολικό (αφού αναπτύσσεται στους προγενέστερους αγωγούς της αναπνευστικής οδού), οπότε τα σωματίδια που τελικά βρίσκονται πιο κοντά στο τοίχωμα του εσωτερικού της διακλάδωσης είναι και αυτά με τη μεγαλύτερη ταχύτητα, γεγονός που προκαλεί ακόμα μεγαλύτερη επίδραση της αδράνειας κατά την απόκλιση. Άμεση συνέπεια του φαινομένου αυτού είναι τοπικά να παρατηρείται πολύ σημαντική εναπόθεση σε αυτή τη μικρή περιοχή του carinal ridge καθώς και λίγο μετά από αυτό. Η εναπόθεση στα ευθύγραμμα τμήματα της διακλάδωσης καθώς και η βαρυτική επικάθηση βρέθηκαν αμελητέα. Έτσι, καταλήγουμε στο ότι δεν έχουν ιδιαίτερη σημασία παράγοντες όπως η γωνία της διακλάδωσης, ο λόγος των διαμέτρων, η συμμετρία ή όχι της ροής καθώς και οι συνθήκες (αριθμός  $Re$ ).

Η βασική διαφορά των παραπάνω στην περίπτωση ασύμμετρης διακλάδωσης είναι ότι η περιοχή του carinal ridge δε βρίσκεται στο κέντρο της διατομής του κεντρικού αγωγού, οπότε και είναι πιο δύσκολο για τα σωματίδια να συγκρουστούν με τα τοιχώματα αφού πρέπει να αποκλίνουν από την κατεύθυνση της κύριας ροής. Έτσι παρατηρούμε ότι για μικρά  $Re$ , η ροή έχει τη δυνατότητα να αποκλίνει από την κύρια αυτή κατεύθυνση και να εισέλθει στο θυγατρικό αγωγό, κουβαλώντας και τα σωματίδια μαζί της. Αντίθετα, σε μεγάλους  $Re$ , η

στροφή αυτή της ροής είναι πιο περιορισμένη, οπότε και έχουμε τη μικρότερη επικάθηση. Συνέπεια των παραπάνω είναι να έχουν μεγαλύτερη επίδραση οι γεωμετρικές και ροϊκές παράμετροι σε σχέση με τη συμμετρική διακλάδωση στη συνολική επικάθηση, και σε όλες τις περιπτώσεις αυτή να είναι αρκετά χαμηλότερη για τις ασύμμετρες διακλαδώσεις. Η βαρύτητα φαίνεται να έχει επίδραση μόνο για χαμηλά  $Re$ , όπου η δυνάμεις αδράνειας εμφανίζονται μειωμένες, αλλά και πάλι μόνο για τα μεγαλύτερα σωματίδια.

Τα συμπεράσματα αυτά ταυτίζονται με πειραματικές και υπολογιστικές μελέτες που έχουν γίνει τόσο στην προηγούμενη δεκαετία όσο και σχετικά πρόσφατα, γεγονός που μας ενισχύει την πεποίθηση ότι τόσο τα υπολογιστικά μοντέλα όσο και η μεθοδολογία της παρούσης εργασίας είναι ορθά και ρεαλιστικά. Μελέτες προσανατολισμένες σε αυτή την κατεύθυνση μπορούν να φανούν χρήσιμες (αν όχι απαραίτητες) σε ιατρικές μελέτες σχετικά με δοσολογίες φαρμάκων μέσω της αναπνευστικής οδού, τοξικολογικές αναλύσεις τόσο σε εργασιακά περιβάλλοντα όσο και σε περιπτώσεις διαδόσεως ασθενειών και θέσπιση κανόνων υγιεινής και επιπέδων μέγιστης έκθεσης του ανθρώπου σε επιβλαβείς ουσίες του ατμοσφαιρικού αέρα.

## 7 Βιβλιογραφία

Asgharian, B. and Anjilvel, S. (1994). Inertial and gravitational deposition of particles in a square cross section bifurcating airway. Aerosol Science and Technology, 20, 177-193.

Balashazy, I. and Hofmann, W. (1993). Particle deposition in airway bifurcations - I. Inspiratory flow. Journal of Aerosol Science, 24(6), 745-772.

Bartnicki, J. (1989). A simple filtering procedure for removing negative values from numerical solutions of the advection equation. Environmental Software, 4(4),

Cai, F. S. and Yu, C. P. (1988). Inertial and interceptional deposition of spherical particles and fibers in bifurcating airway. J. Aerosol Sci., 19, 679-688.

Cheng, Y. S. and Wang, C. S. (1981). Motion of particles in bends of circular pipes. Atmos. Envir., 15, 301-306.

Comer, J. K., Kleinstreuer, C., Kim, C.S. (2001). Flow structured and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. Part 2. Aerosol transport and deposition. Journal of Fluid Mechanics, 435, 55-80.

Comer, J. K., Kleinstreuer, C., Zhang, Z. (2001). Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models: Part1. Air flow fields. Journal of Fluid Mechanics, 435, 25-54.

Drossinos, Y. and Housiadas, C. (2006). Multiphase Flow Handbook. Chapter 6th, Aerosol Flows.: Taylor & Francis.

Fernandez de la Mora, J. and Rosner, D. E. (1982). Effects of inertia on the diffusional deposition of small particles to spheres and cylinders at low Reynolds numbers. Journal of Fluid Mechanics, 125, 379-395.

Ferziger, J. H. and Peric, M. (2002). Computational Methods for Fluid Dynamics.: Springer.

Friedlander, S. K. (1977). Smoke, Dust and Haze. New York: Wiley-Interscience.

Heistracher, T. and Hofmann, W. (1995). Physiologically realistic models of bronchial airway bifurcations. Journal of Aerosol Science, 26(3), 497-509.

Johnston, J. R., Isles, K. D. and Muir, D. C. F. (1977). Inertial deposition of particles in human branching airways. Oxford: Pergamon Press.

Kim, C. S. and Fisher, D. M. (1999). Deposition characteristics of aerosol particles in sequentially bifurcating airway models. Aerosol Science and Technology, *31*, 198-220.

Kim, C. S. and Inglesias, A. J. (1989). Deposition of inhaled particles in bifurcating airway models: inspiratory deposition. J. Aerosol Med., *2*, 1-14.

Kim, C. S., Fisher, D. M., Lutz, D. J., Gerrity, T. R. (1994). Particle deposition in bifurcating airway models with varying airway geometry. Journal of Aerosol Science, *25*(3), 567-581.

Lee, J. W. and Goo, J. H. (1992). Numerical simulation of airflow and inertial deposition of particles in a bifurcating channel of square cross section. J. Aerosol Med., *5*, 131-154.

Leonard BP. (1979). A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. Comput Methods Appl Mech Engng., *19*, 59-98.

Longest, P. H. and Oldham, M. J. (2008). Numerical and experimental deposition of fine respiratory aerosols: Development of a two-phase drift flux model with near-wall velocity corrections. Journal of Aerosol Science, *39*, 48-70.

Longest, P. H. and Oldham, M. J. (2006). Mutual enhancements of CFD modeling and experimental data: A case study of 1- $\mu$ m particle deposition in a branching airway model. Inhalation Toxicology, *18*, 761-771.

Longest, P. W. and Vinchurkar, S. (2007). Effects of mesh style and grid convergence on particle deposition in bifurcating airway models with comparisons to experimental data. Medical Engineering & Physics, *29*, 350-366.

Longest, P. W. and Vinchurkar, S. (2007). Validating CFD predictions of respiratory aerosol deposition: Effects of upstream transition and turbulence. Journal of Biomechanics, *40*, 305-316.

Makris, E., Gkanis, V., Tsangaris, S., Housiadas, C. (2010). A methodology to generate structured computational grids from DICOM data: application to a patient-specific abdominal aortic aneurysm (AAA) model. Computer Methods in Biomechanics Engineering, ,

Makris, E., Neofytou, P., Tsangaris, S., Housiadas, C. (2011). A novel method for the generation of multi-block computational structured grids from medical imaging of artery bifurcations.

Neofytou, P. (2005). A 3rd order upwind finite volume method for generalised Newtonian fluid flows. Advances in Engineering Software, *36*, 664-680.

Neofytou, P. and Tsangaris, S. (2006). Flow effects of blood constitutive equations in 3D models of vascular anomalies. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 51, 489-510.

Neofytou, P. and Tsangaris, S., Kyriakidis, M. (2008). Vascular wall flow-induced forces in a progressively enlarged aneurysm model. Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, 11(6), 615-626.

Oldham, M. J., Phalen, R. F., Heistracher, T. (2000). Computational fluid dynamic predictions and experimental results for particle deposition in an airway model. Aerosol Science and Technology, 21, 61-71.

Patankar S. V. (1983). Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.

Pilou, M., Tsangaris, S., Neofytou, P., Housiadas, C., Drossinos, Y. (2011). Inertial particle deposition in a 90-degree laminar-flow bend: An Eulerian fluid-particle approach. Aerosol Science & Technology,

Pui, D. Y. H., Romay-Novas, F., Liu, D. Y. H. (1987). Experimental study of particle deposition in bends of circular cross section. Aerosol Sci. Technol., 7, 301-315.

Weibel E. R. (1963). Morphometry of the Human Lung. New York: Academic Press.

Zhang, Z. , Kleinstreuer, C., Kim, C. S. (2000). Effects of asymmetric branch flow rates on aerosol deposition in bifurcating airways. Journal of Medical Engineering & Technology, 24(5), 192-202.