



NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING

**INVESTIGATION OF INTERACTIONS BETWEEN
PARTICLES AND FLOWING BIOFLUIDS**

DOCTORAL DISSERTATION

MARIKA PILOU

Mechanical Engineer, M.Sc.

SUPERVISOR:
S. TSANGARIS
NTUA Professor

ATHENS, June 2012



NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING

INVESTIGATION OF INTERACTIONS BETWEEN PARTICLES AND FLOWING BIOFLUIDS

DOCTORAL DISSERTATION

MARIKA PILOU

Mechanical Engineer, M.Sc.

PHD SUPERVISORS:

1. S.Tgangaris, NTUA Prof. (supervisor)
2. C.Housiadas, NCSR 'D' Researcher A'
3. E.Hinis, NTUA Assoc.Prof.

EXAMINATION COMMITTEE:

1. S.Tgangaris, NTUA Prof. (supervisor)
2. C.Housiadas, NCSR 'D' Researcher A'
3. E.Hinis, NTUA Assoc.Prof.
- 4 D.Papantonis, NTUA Prof.
5. D.Mathioulakis, NTUA Assoc. Prof.
6. J.Anagnostopoulos, NTUA Assist. Prof.
7. V.Riziotis, NTUA Lect.

Approval of the doctoral dissertation from the School of Mechanical Engineering of the National Technical University of Athens does not imply acceptance of the opinions of the author (Law 5343/1932, Article 202).

ATHENS, June 2012

Dedicated to my parents, Nikos & Tasia.

ACKNOWLEDGMENTS

This study was funded by a scholarship from the National Centre for Scientific Research (NCSR) “Demokritos” and was conducted in the Thermal Hydraulics and Multiphase Flow Laboratory of the Institute of Nuclear & Radiological Sciences & Technology, Energy & Safety* of NCSR “Demokritos” in collaboration with the Laboratory of Biofluid Mechanics and Biomedical Engineering of School of Mechanical Engineering of the National Technical University of Athens (NTUA).

I would like to express my sincere appreciation and gratitude to Dr. Sokrates Tsangaris, Professor of NTUA and Head of the Laboratory of Biofluid Mechanics and Biomedical Engineering of School of Mechanical Engineering, and Dr. Christos Housiadas, Senior Researcher and Head of the Thermal Hydraulics and Multiphase Flow Laboratory of NCSR “Demokritos”, who introduced me to the fields of computational fluid dynamics and multiphase flows, respectively. Their consistent and tireless scientific and moral support through out the duration of my study contributed decisively to its completion.

Moreover, I would like to thank Dr. Evangelos Hinis, Associate Professor of NTUA, for his remarks on my work and the help in preparing the final presentation of the Thesis.

In addition, I would like to thank Dr. Panayotis Neofytou, who provided me with his CFD code for the calculation of the fluid flow fields (CADBA) and helped me significantly in understanding different numerical methods.

This work has also benefited greatly from much advice, and many useful discussions with Dr. Yannis Drossinos, Senior Researcher in Joint Research Centre of the European Commission in Ispra. Thanks also to Dr. Dimitris Mitrakos, who helped me greatly during the first year of my PhD by facilitating my introduction to multiphase flows, and to Mr. Evangelos Makris, fellow PhD candidate, for the interaction and for providing me with the grids for the bifurcation application.

As well as the people mentioned above, a mention must also go to the many friends in Institute of Nuclear Technology and Radiation Protection of NCSR “Demokritos”, who made it such an interesting and fun place to work.

Last but not least, I would like to thank my parents, Nikos and Tasia, and my brother, Dimitris, who supported me in every possible way during my studies, and my husband, Tasos, for his constant encouragement and love all these years.

*former Institute of Nuclear Technology and Radiation Protection.

ABSTRACT

The numerical modelling of the transport of particles suspended in flowing biofluids, whether they are beneficial (e.g. pharmaceuticals) or harmful (e.g. pollution) for humans, is the main objective of this work. In particular, the mechanisms underlying the particles - fluid interactions are investigated employing techniques of fluid dynamics. The solution of the continuous phase is treated by Computational Fluid Dynamics (CFD) methods based on an existing code. Special emphasis during development of the model is given in solving the transport of the particulate phase within an Eulerian description (spatial description). This description results in direct handling of particles diffusion, as well as the straightforward calculation of the particle mass concentration. However, inertial effects can not be easily included in the Eulerian form of the Particle Transport Equation. For this reason, an approximate expression of the particles velocity should be used for the integration of their inertial effects in the Eulerian approach.

In the present thesis, the fluid-particle flow in the limit of low mass load and volume fraction is described through an Eulerian formalism. One-way coupling of the dispersed phase is considered whereby the disperse-phase motion is affected by the continuous phase, but not vice versa. In the Eulerian description of the dispersed phase we approximate the particle velocity in the mass conservation equation of the dispersed (particulate) phase by an expression obtained in the limit of low particle relaxation time. The particle velocity is decomposed into a diffusive term, which depends on the particle concentration gradient, and a convective term, independent of particle concentration. The convective particle velocity is essentially the velocity of the carrier fluid corrected by the inertial drift (or slip) and the gravitational settling or other externally-induced velocities, thereby introducing particle inertial and body force effects in the Eulerian form of the particle transport equation (PTE).

The aforementioned treatment of PTE and its use to describe the transport and deposition of heavy, inert particles suspended in flowing fluid is the main innovative aspect of this thesis. The proposed fully Eulerian methodology offers clear advantages; *a*) it does not require time and effort consuming particle tracking histories in order to obtain accurate statistics; *b*) it takes into account particle transport due to diffusion and inertia simultaneously, thus it is valid for a wide range of particle sizes; *c*) it is fairly simple, as it decouples the mass and momentum equations of the particulate phase and the particle velocity is given only in terms of the fluid velocity and its spatial derivative; *d*) particle concentration is directly calculated as natural part of the solution of the particle transport equation.

The numerical treatment of the particulate phase transport is based on CFD techniques. In particular, the particles transport equation is solved in three dimensions using a finite volume method with a collocated arrangement of variables that takes into account grid non-orthogonality and is suitable for multi-block grids. In the code, the convective term is discretized using a second-order deferred correction approach, while a second-order central difference scheme is preferred for the diffusive term. Moreover, we succeeded in proposing and validating a novel numerical approach to the wall boundary condition, where the usual totally absorbing wall condition is combined with the strong convective fluxes towards the wall.

The validation of the proposed methodology shows that particle diffusion and gravitational settling are predicted accurately. More importantly, the validity of the particle velocity approximation for higher particle relaxation times (or equivalently higher Stokes numbers) is investigated, where inertial effects are important and gravitational settling may not be a priori neglected. Thus, the results of the fully Eulerian methodology are validated against analytical, numerical, and experimental data available in literature. From the comparison it is shown that the proposed methodology can accurately predict inertia-induced particle deposition efficiencies and that the particles deposition sites indicated in the present study are in good agreement with experimental observations.

The developed model is used to study the three-dimensional transport and deposition of particles suspended in flowing fluids in simple geometries, which can be considered, though, as building-blocks of both the respiratory and cardiovascular system. In particular, the fully Eulerian model is used to study particle inertial effects in aerosol flows inside a 90° bend of circular cross-section, as well as, in a physiologically realistic single bifurcation. In addition, the model is employed in order to investigate transport and deposition of magnetic particles suspended in a flowing liquid medium under the influence of an external magnetic field.

As shown by the practical applications that we have undertaken, with appropriate use and then detailed analysis of numerical predictions, the model can contribute to the interpretation of observed behavior of particles in the respiratory or cardiovascular system, offering thus better physical insight and serving as a tool for the design and optimization of biomedical applications.

PUBLICATIONS

Some ideas and figures have appeared previously in the following publications:

Peer Reviewed Journals:

- **M. Pilou**, S. Tsangaris, P. Neofytou, C. Housiadas and Y. Drossinos, *Inertial particle deposition in a 90° laminar flow bend: An Eulerian fluid particle approach*, *Aerosol Science and Technology*, 45: 1376-1387, 2011

Peer Reviewed European and International Conferences:

- **M. Pilou**, E. Makris, P. Neofytou, S. Tsangaris and C. Housiadas, *Computational study of aerosol flow in a physiologically realistic bifurcation under the influence of an external magnetic field*, European Aerosol Conference, 2 - 7 September 2012, Granada (accepted)
- **M. Pilou**, V. Antonopoulos, E. Makris, P. Neofytou, S. Tsangaris and C. Housiadas, *Computational Study of Particle Deposition in a Physiologically Realistic Bifurcation*, 4th NanoImpactNet Integrating Conference and 1st QNano Integrating Conference, 27 February - 2 March 2012, Dublin
- **M. Pilou**, P. Neofytou, Y. Drossinos, S. Tsangaris and C. Housiadas, *Modelling of particle inertial effects: Aerosol depositions in a 90° bend*, Ref. No. 46, 7th GRACM International Congress on Computational Mechanics, 30 June - 2 July 2011, Athens
- **M. Pilou**, D. Saraga, S. Tsangaris, C. Vasilakos and C. Housiadas, *Particle deposition in the lung during domestic activities*, Abstract Number 754, International Aerosol Conference 2010, 29 August - 03 September, Helsinki
- **M. Pilou**, D. Saraga, P. Neofytou, C. Vasilakos and C. Housiadas, *Internal dose estimation from particulate matter exposure in an office environment*, Abstract Number P108, Nanotoxicology 2010, 2-4 June, Edinburgh
- **M. Pilou**, V. Gkanis, P. Neofytou and C. Housiadas, *Computational study of aerosol flow in bifurcations*, European Aerosol Conference, 6 - 11 September 2009, Karlsruhe
- **M. Pilou**, P. Neofytou, Y. Drossinos, S. Tsangaris and C. Housiadas, *Effects of particles inertia in CFD-based aerosol modelling*, European Aerosol Conference, 24 - 29 August 2008, Thessaloniki

CONTENTS

I INTRODUCTION	1
1 INTRODUCTION	3
II FORMULATION	9
2 THEORY & MODEL DESCRIPTION	11
2.1 Continuous Phase	11
2.1.1 Continuous Phase: Governing Equations	11
2.1.2 Continuous Phase: Numerical Solution	14
2.2 Dispersed Phase	15
2.2.1 Dispersed Phase: General Theoretical Remarks	15
2.2.2 Dispersed Phase: General Dynamic Equation	17
2.2.3 Dispersed Phase: Deposition Mechanisms	18
2.2.4 Dispersed Phase: Transport and Deposition of Particles	22
2.2.5 Dispersed Phase: Boundary Conditions	27
2.2.6 Dispersed Phase: Numerical Solution	28
2.3 Conclusions	35
3 VALIDATION	37
3.1 Validation of the Diffusive Term	37
3.2 Validation of the External Force Term	38
3.3 Validation of the Inertial Term	40
3.3.1 Bend Geometry and Computational Grid	41
3.3.2 Continuous Phase	42
3.3.3 Dispersed Phase	44
3.3.4 Grid Independence	48
3.4 Conclusions	49
III APPLICATIONS	51
4 PARTICLE INERTIAL EFFECTS: BEND	53
4.1 Bend: Air Flow	53
4.2 Bend: Aerosol Particles	56
4.2.1 Effect of Gravity	56
4.2.2 Effect of Fluid Flow Reynolds Number	61
4.2.3 Effect of Curvature Ratio	62
4.3 Conclusions	63
5 PARTICLE INERTIAL EFFECTS: PHYSIOLOGICALLY REALISTIC BIFURCATION	69
5.1 Geometry & Grid	71
5.2 Simulations	72
5.2.1 PRB: Air Flow	73
5.2.2 PRB: Aerosol Particles	77
5.3 Conclusions	81
6 MAGNETOPHORESIS	83
6.1 Basic Concepts of Magnetic Fields & Materials	83
6.2 Magnetic Force on Particles	85

6.2.1	Linear Magnetization Model	86
6.2.2	Superparamagnetic Particles - Langevin Function	88
6.2.3	Generalization	89
6.3	Magnetic Fields	89
6.3.1	Magnetic Field of an Infinitely Long Straight Wire Carrying a Current I	89
6.3.2	Magnetic Field of a Circular Line Current	90
6.3.3	Magnetic Field of FM Wires in a Uniform External Magnetic Field	90
6.4	Particle Magnetic Velocity	92
6.5	Particles PTE in Magnetophoresis	94
6.6	Simulations & Results	95
6.6.1	Comparison with Haverkort <i>et al.</i> (2009)	96
6.6.2	Comparison with Chen <i>et al.</i> (2007, 2008a,b)	99
6.7	Conclusions	102
IV	EPILOGUE	105
7	CONCLUSIONS & FUTURE WORK	107
	ΣΤΥΝΟΨΗ	113
	APPENDIX	185
A	MAGNETIC FIELD OF FERROMAGNETIC WIRES	187
	BIBLIOGRAPHY	191
	BIBLIOGRAPHY	193

LIST OF FIGURES

Figure 1	Generic finite computational volume.	11
Figure 2	Example of discrete (a) and continuous (b) particle size distributions (adapted from Crowe and Michaelides (2006)).	16
Figure 3	Cunningham factor for spherical particles of standard density suspended in air at standard conditions.	20
Figure 4	Topology of a Cartesian grid (a) and the control volume (b) (adapted from Neofytou and Tsangaris (2006)).	29
Figure 5	Typical Cartesian control volume and the notation used. For simplicity and clarity a two dimensional CV is shown (adapted from Ferziger and Perić (2002)).	30
Figure 6	Typical non-orthogonal computational volume and the notation used. For simplicity and clarity a two dimensional CV is shown (adapted from Ferziger and Perić (2002)).	32
Figure 7	Topology in the case of arbitrary CV shape (adapted from Ferziger and Perić (2002)).	32
Figure 8	Mixing temperature in a straight duct of circular cross-section for different thermal Peclet numbers.	38
Figure 9	Aerosol particle sedimentation in a tube of circular cross-section of diameter d_t and length L , which is at angle θ from the horizontal. Poiseuille fluid flow, with mean velocity v_m is considered (adapted from Finlay (2001)).	39
Figure 10	Deposition fraction of particles sedimenting in a straight duct of circular cross-section.	40
Figure 11	Bend geometry ($R_b = 2.85$, $R_o = 5.7$); A-A is the diameter of the cross-section at the symmetry plane and B-B the diameter perpendicular to it.	42
Figure 12	Orientation of the bends with respect to the acceleration of gravity; (a) vertical inlet (CDIGx), (b) horizontal inlet - vertical outlet (CDIGy) and (c) totally horizontal tube (CDIGz).	42
Figure 13	Grid cross-section	43
Figure 14	Axial velocity profiles at $\theta = 0^\circ$ (inlet), $\theta = 45^\circ$ and $\theta = 90^\circ$ (exit) cross sections along the diameters A-A (left) and B-B (right). (a) $De = 38$; (b) $De = 423$. Results of this study are shown with a continuous line, results of Tsai and Pui (1990) are shown with a dashed line.	43
Figure 15	Secondary-flow streamlines and contours of constant axial velocity at $\theta = 45^\circ$ (top) and $\theta = 90^\circ$ (bottom) cross sections for $De = 38$ (left) and $De = 423$ (right).	44
Figure 16	Deposition fraction – Comparison with analytical results of Cheng and Wang (1975).	44
Figure 17	Deposition fraction for $De = 38$ — Comparison with experimental measurements.	46

- Figure 18 Deposition fraction for $De = 419$ — Comparison with experimental measurements and numerical simulations. 46
- Figure 19 Particle concentration at $\theta = 45^\circ$ (top row) and $\theta = 90^\circ$ (bottom row) cross sections along the bend. (a) $De = 38$ (first two columns) and (b) $De = 419$ (last two columns). 47
- Figure 20 Particle concentration at the wall boundary.(a) Top: $De = 38$; (b) Bottom: $De = 419$. 47
- Figure 21 Effect of bend curvature ratio R_o on axial velocity profiles at $\theta = 45^\circ$ (left) and $\theta = 90^\circ$ (right) cross-sections along the diameters (a) A-A and (b) B-B, for low Reynolds number ($Re = 100$). 54
- Figure 22 Effect of bend curvature ratio R_o on axial velocity profiles at $\theta = 45^\circ$ (left) and $\theta = 90^\circ$ (right) cross-sections along the diameters (a) A-A and (b) B-B, for high Reynolds number ($Re = 700$). 54
- Figure 23 Effect of Reynolds number on axial velocity profiles at $\theta = 45^\circ$ (left) and $\theta = 90^\circ$ (right) cross-sections along the diameters (a) A-A and (b) B-B, for high bend curvature ratio ($R_o = 8.3$). 55
- Figure 24 Effect of Reynolds number on axial velocity profiles at $\theta = 45^\circ$ (left) and $\theta = 90^\circ$ (right) cross-sections along the diameters (a) A-A and (b) B-B, for low bend curvature ratio ($R_o = 4.4$). 56
- Figure 25 Effect of Dean number on the secondary-flow streamlines and contours of constant axial velocity at $\theta = 45^\circ$ (top) and $\theta = 90^\circ$ (bottom) cross sections for $Re = 100$. 56
- Figure 26 Effect of Dean number on the secondary-flow streamlines and contours of constant axial velocity at $\theta = 45^\circ$ (top) and $\theta = 90^\circ$ (bottom) cross sections for $Re = 500$. 57
- Figure 27 Effect of Dean number on the secondary-flow streamlines and contours of constant axial velocity at $\theta = 45^\circ$ (top) and $\theta = 90^\circ$ (bottom) cross sections for $Re = 1000$. 57
- Figure 28 Effect of gravity on particle deposition fraction for $De = 38$. 58
- Figure 29 Effect of gravity on particle deposition fraction for $De = 419$. 58
- Figure 30 Effect of gravity on particle concentration profiles for low Stokes number particles; (a) $De=38$, (b) $De=419$. 59
- Figure 31 Effect of gravity on particle concentration profiles for high Stokes number particles; (a) $De=38$, (b) $De=419$. 60
- Figure 32 Effect of gravity on particle deposition sites for low Stokes number particles; (a) $De=38$, (b) $De=419$. 61
- Figure 33 Effect of gravity on particle deposition sites for high Stokes number particles; (a) $De=38$, (b) $De=419$. 62
- Figure 34 Effect of fluid flow Reynolds number on particle deposition fraction for $R_o = 5.7$. 62
- Figure 35 Effect of fluid flow Reynolds number on particle concentration profiles for $R_o = 5.7$; (a) $St = 0.35$, (b) $St = 1.21$ 63
- Figure 36 Effect of fluid flow Reynolds number on particle deposition sites for $R_o = 5.7$; (a) $St = 0.35$, (b) $St = 1.21$ 64
- Figure 37 Effect of curvature ratio on particle deposition fraction for $Re = 100$. 64
- Figure 38 Effect of curvature ratio on particle deposition fraction for $Re = 1000$. 65

- Figure 39 Effect of curvature ratio on particle concentration profiles; (a) low Stokes number particles, (b) high Stokes number particles. 66
- Figure 40 Effect of curvature ratio on particle deposition sites; (a) low Stokes number particles, (b) high Stokes number particles. 67
- Figure 41 (a) Centerlines and geometrical characteristics of the G₃-G₄ bifurcation (due to geometrical symmetry only one daughter tube is shown), (b) Constructed surface of the G₃-G₄ bifurcation with curved carinal ridge, (c) unstructured surface grid, and (d) structured volume grid and grid cross-section. 72
- Figure 42 Definition of cross-sections and diameters of interest. 74
- Figure 43 Axial velocity profiles for different Reynolds numbers at cross-sections A-A (left), B-B' (centre) and C-C' (right) for symmetric flow at the diameters H-H (a) and V-V (b). 74
- Figure 44 Axial velocity profiles for Re = 1132 and asymmetric flow at the diameters H-H (a) and V-V (b). Corresponding cross-sections at both daughter tubes are shown. 75
- Figure 45 Contour of fluid velocity magnitude and vectors at the plane of symmetry of the PRB ($z = 0$) and secondary flow streamlines and constant velocity magnitude contours at different cross-sections downstream the bifurcation; (a) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 464$, (b) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1132$, (c) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1788$, (d) $Q_1/Q_2 = 2, Re = 1132$, and (e) $Q_2 = 0, Re = 1132$. 76
- Figure 46 Main fluid flow streamlines at the plane of symmetry of the PRB ($z = 0$). Comparison between different Reynolds numbers for flow symmetry (a,b,c) and Re = 1132 and asymmetric flow (b,d,e). 77
- Figure 47 Total deposition fraction for symmetric flow. Comparison with the experimental results of Kim et al. (1994). 78
- Figure 48 Total deposition fraction for asymmetric flow (Re = 1132). 78
- Figure 49 Deposition fraction along the axis of the bifurcation in (a) the case of symmetric flow for different Reynolds numbers and (b) the case of Re = 1132 for symmetric ($Q_1/Q_2 = 1$) and asymmetric ($Q_1/Q_2 = 2, Q_2 = 0$) flows. 79
- Figure 50 Particle concentration profiles at cross-sections downstream the bifurcation and particle deposition sites on the PRB wall for low Stokes number, $St = 0.01$; (a) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 464$, (b) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1132$, (c) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1788$, (d) $Q_1/Q_2 = 2, Re = 1132$, and (e) $Q_2 = 0, Re = 1132$. 80
- Figure 51 Particle concentration profiles at cross-sections downstream the bifurcation and particle deposition sites on the PRB wall for high Stokes number, $St = 0.1$; (a) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 464$, (b) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1132$, (c) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1788$, (d) $Q_1/Q_2 = 2, Re = 1132$, and (e) $Q_2 = 0, Re = 1132$. 81
- Figure 52 Indicative M – H hysteresis loop. 85
- Figure 53 Circular current carrying loop (adapted from Haverkort et al. (2009a)). 90
- Figure 54 Geometry and systems of coordinates for 1 FM wire. 91
- Figure 55 Geometry and systems of coordinates for 2 FM wires. 92
- Figure 56 Details of systems of coordinates for 2 FM wires and components of the \vec{H} . 93

Figure 57	Schematic diagram of the geometry used by Haverkort et al. (2009a) . The position $\mathbf{1}$ (pos1) of the infinitely long current carrying wire is shown here. 97
Figure 58	Magnetization force per unit volume, f_m [N/m^3], for different locations of the current carrying wire. 98
Figure 59	Deposition fraction for different locations of the current carrying wire. The results of the Eulerian model are shown in continuous lines, whereas the results of Haverkort et al. (2009a) in dotted lines. 98
Figure 60	Loop position around the bend. Definition of angle γ (adapted from Haverkort et al. (2009a)). 99
Figure 61	Deposition fraction as a function of the current carrying loop location (γ angle). The results of the present work (Eulerian model) are shown in dashed lines, whereas the results of Haverkort et al. (2009a) in dotted lines. 99
Figure 62	Deposition fraction as a function of the particle diameter at different locations of the current carrying loop. 100
Figure 63	Geometry used in the works of Chen et al. (2007b, 2008b,c) . 101
Figure 64	(a) Magnetic field (dimensionless); the streamlines of \vec{H} and its magnitude (contour) are shown. (b) Magnetic force density for base case properties. 101
Figure 65	Deposition fraction as a function of the magnetic field induction $B_o = \mu_o H_o$ [T] for $v_o = 5\text{cm/s}$ (top) and $v_o = 8\text{cm/s}$ (bottom) - Comparison with the results of Chen et al. (2007b) . 102
Figure 66	Deposition fraction as a function of the mean fluid velocity v_o [cm/s] ($B_o = \mu_o H_o = 0.5\text{T}$) for water, $\mu_f = 0.001\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$ (top), and for Ethylene Glycol, $\mu_f = 0.004\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$ (bottom) - Comparison with the results of Chen et al. (2008c) . 102

LIST OF TABLES

Table 1	Fluid and particle properties used in the 90° bend simulations. 45
Table 2	A measure of grid convergence; the root mean square error of particle concentration ϵ_{RMS} for different grid densities (coarse and fine). 48
Table 3	Fluid and particle properties used in the 90° bend parametric study. 53
Table 4	Geometrical characteristics of G3-G4 bifurcation according to Weibel (1963) . 71
Table 5	Fluid and particle properties used in the PRB simulations. 73
Table 6	Characteristic quantities of the problem used to render dimensionless particle transport equation 94
Table 7	Fluid and particle properties used in the comparison with Haverkort et al. (2009a) . 96
Table 8	Fluid and particle properties used in the comparison with Chen et al. (2007b) . Underlined are the base case properties. 100

Table 9	Wire and external field properties used in the comparison with Chen et al. Chen et al. (2007b) . Underlined are the base case properties. 100
---------	---

Part I
INTRODUCTION

INTRODUCTION

A considerable volume of epidemiological studies associate the environmental exposure to aerosol particles with severe health effects, such as increased morbidity of the respiratory and the circulatory system, or even with increased mortality (Russell and Brunekreef, 2009; Mills et al., 2009; Dvonch et al., 2009). Furthermore, there is recent evidence that fine particles can penetrate the lung epithelium, the epithelium of the gastrointestinal tract or the skin. As a result, a significant amount of particles may enter the blood stream and be transferred to the heart and the tissues (Simkhovich et al., 2008). Emerging new technologies like nanotechnology may pose additional risks from the exposure to micro-nano-particles. On the other hand, new possibilities in nanomedicine arise through the development of nano-drugs and nano-diagnostic systems, which are inserted in the respiratory and circulatory systems for therapeutic or diagnostic purposes (Sung et al., 2007; Gagnadoux et al., 2008; Plank, 2008; Dusinska et al., 2009; Misra et al., 2011). The behavior of the particles in these systems is today a topic of high scientific interest.

A suspension of particles in a fluid is a multiphase system, that is a system comprising of a mixture of phases. Two kinds of fluid-particles systems are of particular importance in biomedical applications; the suspension of solid or liquid particles into a gas, known as aerosol, and the suspension of solid particles into a liquid, known as colloid. The terms aerosol and colloid refer to both the particles and the carrier fluid, i.e. to the two-phase flow. In order to refer specifically to the fluid the term continuous phase is used, whereas for the suspended particles the terms dispersed or particulate phase apply.

In the applications of interest here, the particle size ranges from a few nanometers ($1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$) to several micrometers ($1\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m}$). Moreover, for most two-phase flows in the respiratory and the cardiovascular systems, the particulate phase is dispersed enough, i.e. the total volume of the particles does not exceed 0.0001% of the total volume, thus one-way coupling of the phases can be assumed. This means that, although the behavior of particles into the system is influenced by the fluid flow field, the particulate phase has negligible effect on the carrier fluid.

In practical situations, the population of the suspended particles is changing; it changes due to various physical processes, such as nucleation, hygroscopic growth and coagulation/aggregation. Moreover, particles move as a result of the carrier fluid flow, the presence of gradients (i.e. phoretic phenomena) and the influence of external force fields.

Modelling of the particle dynamics and transport, can be particularly beneficial in two specific respects; *a*) it can provide useful physical insight and enable the interpretation of systems without the need of experiments, and *b*) it can be used for parametric investigation and optimization of already developed systems. Of course, the numerical modelling of the particulate phase needs to be combined with the respective numerical modelling of the fluid flow, as in most applications, including biomedical ones, the fluid-particle systems are flowing. Quite often these flows are three-dimensional and rather complex.

The present thesis deals with particle systems in biofluid flows. The most common biofluids flows are the air flow in the respiratory system and the blood flow in the

circulatory system. Historically, the particle-laden air flow in the respiratory system has been first investigated – even Leonardo Da Vinci was interested in dust deposition in the lungs.

In the respiratory system it is common to distinguish between two broad categories of models for the fluid-particle systems; the empirical and the mechanistic (Housiadas and Lazarides, 2010). The former are usually based on a combination of theoretical and empirical expressions and they are simple enough to be used for operational purposes. However, their application is limited to the conditions, for which their parameters have been obtained, and by the fact that they do not incorporate particle dynamics. Mechanistic models, on the other hand, predict particle transport and deposition as a result of various physical processes and their main advantage is that they are applicable under a variety of conditions.

A sub-category of the mechanistic models is those based on Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques. Although these models are complicated and usually computationally expensive, and because of that not readily operational, they have strong physical basis and provide a detailed description of deposition; the fluid flow field and the particle concentration are calculated in detail. Thus, CFD-based models of the particulate phase are particularly suitable for simulation of microphysical details of the complex aerosol flows in the respiratory system (Housiadas and Lazarides, 2010).

The CFD-based mechanistic models can be further divided into two major categories based on the frame used for the description of the fluid and particle motion; the Lagrangian modelling, where a moving frame of reference is used, and the Eulerian modelling, where a fixed frame of reference is employed.

The numerical modelling of the transport of particles suspended in flowing biofluids, whether they are beneficial (e.g. pharmaceuticals) or harmful (e.g. pollution) for humans, is the main objective of the present thesis. In this study the main goal is to investigate how inertia and body forces affect transport and deposition of particles on the “walls” of the respiratory and circulatory systems.

Particle inertial effects are important in many fluid-particles applications and have been investigated analytically, experimentally and numerically in the literature. The simple geometry of a 90° bend of circular cross-section is often employed for these studies, where due to the change of direction of the fluid flow particle inertia is easily demonstrated.

The most extensive experimental study of particle deposition in a 90° bend of circular cross-section up to now has been conducted by Pui et al. (1987). Measurements were performed for both laminar and turbulent flows using monodisperse aerosol populations. The bends were of different tube diameters d_t and the bend curvature ratios R_o , defined as $R_o = R_b/(d_t/2)$ with R_b the bend radius, varied from 5.6 to 7.

Theoretical calculations of particle deposition in a 90° bend of circular cross-section due to inertial effects were initially performed by Cheng and Wang (1975). They derived an analytical solution of the particle equations of motion to obtain impaction efficiencies using an idealized, analytical axial fluid flow field, neglecting the bend secondary flow. They concluded that impaction efficiency depends weakly on the bend curvature. In a later publication (Cheng and Wang, 1981), they used the Mori and Nakayama (1965) analytical, laminar flow field to calculate inertial particle deposition for Reynolds numbers (Re) 100 and 1000 and $R_o = 8$. The Mori & Nakayama flow models fully developed bend flow, the secondary flow modelled by a core region and a boundary layer, which however is compressible. They concluded that the deposition efficiency depends primarily on

the particle Stokes number, a dimensionless measure of particle inertia, and the flow Reynolds number. Their numerical results were in good agreement with the experimental measurements of Pui et al. (1987) for the high Reynolds-number flow ($Re = 1000$), but they differed for the low Reynolds-number flow ($Re = 100$). A possible reason for the discrepancy is that the analytical flow models fully developed bend flow, thus not being applicable to low Reynolds-number flows.

Numerical investigations of particle deposition due to the fluid-inertia induced secondary flow have also been carried out. Crane and Evans (1977) solved the carrier gas (continuous phase) using the numerical technique developed by Rowe for an inviscid flow and Lagrangian particle tracking for the particulate phase. They used an axisymmetric flow velocity profile at the inlet to determine the secondary flow, and they simulated turbulent droplet flows in a bend of curvature ratio 4. They showed that particle trajectories were strongly affected by the secondary flow, but deposition efficiency was less dependent on it.

A more realistic approach of a three dimensional developing flow field in a 90° bend was adopted by Tsai and Pui (1990), who calculated the fluid flow with an elliptic three dimensional finite-difference code; deposition efficiency was calculated by solving the particle equations of motion. Apart from the influence of the Stokes number on the deposition efficiency, they studied the effect of the Dean number ($De = Re/\sqrt{R_0}$), of the bend curvature ratio, and of the inlet velocity profile. Breuer et al. (2006) simulated particle transport and deposition in a 90° bend of circular cross section using a flow field calculated via Large-Eddy Simulations and Lagrangian particle tracking for the particulate phase. They studied deposition in a flow with $Re = 10000$, but their method was validated at $Re = 1000$. Their solution was found to be in good agreement with experimental and previous numerical results.

All the aforementioned numerical methods use a Lagrangian description of the particulate phase, whereby the particle equations of motion are solved (either numerically or analytically) to determine the deposition efficiency. The Lagrangian approach is the most frequent choice in that it provides a convenient and easy to implement method to treat inertial effects. However, the determination of important quantities as, for example, the local particle concentration field (Slater and Young, 2001) or the mean interphase momentum transfer (Garg et al., 2009), are particularly difficult to obtain. A large number of particle trajectories has to be calculated to minimize statistical error (Desjardins et al., 2008), rendering the Lagrangian approach computationally inefficient. The control of the numerical error associated with Lagrangian-Eulerian simulations becomes more important for highly non-uniform spatial distributions of particles since the number of simulated particles in a grid cell decreases; accordingly, the statistical error, which is inversely proportional to the square root of the number of particles per cell, increases (Garg et al., 2009). Recent advances in numerical implementations of Lagrangian-Eulerian method have addressed this issue by introducing improved error estimators to obtain numerically convergent simulations (Garg et al., 2009). In addition, if Brownian particle diffusion is of importance the number of simulated particle trajectories further increases to minimize the noise that arises from the stochastic particle motion.

A distinct advantage of the Lagrangian approach is that it easily captures particle-trajectory crossings for finite-inertia (finite Stokes number) particles, namely cases where the particle velocity distribution is not uni-modal and a finite probability exists that particles at the same location have different velocities. Such situations may occur when two particle jets cross, when a particle jet impinges on a surface and it rebounds, or

for finite-Stokes number particle flows in Taylor-Green vortices. A recently proposed quadrature-based Eulerian moment closure was shown to predict accurately flows with particle-crossing trajectories (Desjardins et al., 2008).

Notable alternatives to the Eulerian-Lagrangian calculations are the works of Lawson et al. (2006) and Armand et al. (1998). The former attempted to calculate the particle concentration in a bend by a fully Lagrangian method proposed by Healy and Young (2005). Accordingly, the particle concentration was determined by calculating the deformation (dilation or compression) of an infinitesimal rectangular volume along the trajectory of a single particle. Armand et al. (1998) proposed and validated, in both laminar and turbulent regimes, an Eulerian approach that included inertial particle drift in a two-fluid model. The particle velocity was determined by solving numerically the coupled dispersed-phase mass and momentum equations. Furthermore, they approximated the laminar flow in a 90° circular bend by the flow between two curved parallel plates; their results were in good agreement with the experimental data of Pui et al. (1987) and the numerical solution of Tsai and Pui (1990) at $Re = 1000$.

The particle population balance equation (PBE) in an Eulerian description examines aerosol processes (e.g., transport, nucleation, growth, and coagulation) in a fixed elemental volume; diffusion is, thus, treated directly and particle concentration is calculated in a straightforward manner. However, inertial effects can not be easily included in the standard form of the PBE. In the present thesis, an approximate expression for the particle velocity is used to incorporate inertial effects in an Eulerian formalism.

This Eulerian approach offers significant advantages over two-fluid models that do not decouple the mass and momentum conservation equations of the dispersed phase. Firstly, the numerical solution of the particle momentum equation is not required to determine the particle velocity field, as the momentum effects have been accounted for perturbatively. As a result, the particle velocity is expressed solely in terms of the fluid velocity and its spatial derivatives (in steady state). Moreover, it can be used for small particle diameters where the particle equations of motion in a Lagrangian approach become numerically stiff. Finally, it is more accurate than passive tracer models since it can take into account simultaneously diffusive and inertial particle transport.

Efforts along this direction have been made for submicrometer particles. Longest and Oldham (2008) developed an Eulerian-Eulerian model to predict particle deposition in a laminar bifurcating flow system for cases in which diffusion and inertia are important for particle deposition. They extended the drift flux approach with near-wall corrections to account for particle deceleration between the nearest control volume center and the wall surface. Xi and Longest (2008a) extended this Eulerian-Eulerian model to also account for both aerosol dispersion in turbulent and unsteady flows, and they applied the model to predict deposition in a realistic model of the tracheobronchial airways. Moreover, Xi and Longest (2008b) applied the Eulerian-Eulerian model to predict particle deposition due to inertia, diffusion, and turbulent dispersion in a complex model of the nasal cavity. Similarly, Zhao et al. (2009) presented a generalized drift-flux model for turbulent flows of ultrafine particles in indoor environments. These studies also reported particle concentration and deposition profiles.

In this work, we use an Eulerian-Eulerian description of a dilute dispersed flow in the limit of low mass loading and low volume fractions. One-way coupling of the dispersed phase is considered whereby the disperse-phase motion is affected by the continuous phase, but not vice versa. In the Eulerian description of the dispersed phase we approximate the particle velocity in the mass conservation equation of the dispersed

(particulate) phase, or equivalently the PBE, by an expression obtained in the limit of low particle relaxation time. The particle velocity is decomposed into a diffusive term, which depends on the particle concentration gradient, and a convective term, independent of particle concentration. The convective particle velocity becomes the fluid velocity corrected by the inertial drift (or slip) and the gravitational settling or other externally-induced velocities, thereby introducing particle inertial and body force effects in the Eulerian form of the PBE. The validity of the particle velocity approximation for higher particle relaxation times is of primary importance in order to assess the validity range of the employed approximation.

The modified Particle Transport Equation (PTE), that is the PBE without the effects of nucleation, growth and coagulation, is solved numerically in three dimensions using a CFD methodology. Particle concentration is obtained by imposing the commonly used condition of totally absorbing wall (zero particle concentration at the wall). The particle deposition flux is calculated as the sum of a convective and diffusive flux.

To our knowledge, this is the first time that the transport and deposition of heavy, inert particles are predicted using an Eulerian formalism of the particles transport equation. As shown in a number of practical applications that we have undertaken, with appropriate use and then detailed analysis of numerical predictions, the model can contribute to the interpretation of observed behavior of particles in the respiratory or cardiovascular system, offering thus better physical insight and serving as a tool for the design and optimization of biomedical applications.

The structure of the thesis is the following:

- In Chapter 2 the theoretical background regarding fluid-particles flows is given and the numerical models used are outlined. Specifically for the particulate phase, the way that the particle inertial effects are incorporated in an Eulerian formulation of the particles transport equation is described in detail.
- The validation of the proposed methodology is performed in Chapter 3. The diffusion and external force terms are validated separately, prior to the validation of the whole model. The results of the Eulerian model are compared to findings of various experimental, analytical and computational studies available in literature.
- In Chapters 4 and 5, the developed Eulerian particle-fluid model is used in order to study the effect of aerosol particle inertia in two basic geometries, which however constitute building blocks of the respiratory system; a 90° bend and a bifurcation. The effects of particle size and fluid flow characteristics are examined. Particle deposition fractions and concentration profiles are calculated and deposition sites are indicated.
- In Chapter 6, the developed Eulerian model is used to study transport and deposition of particles suspended in a liquid medium under the influence of an external magnetic field, as employed in the circulatory system.
- Finally, in the Chapter 7, the main findings of the thesis are summarized and ways, in which the presented methodology can be further developed, are provided.

Part II
FORMULATION

THEORY & MODEL DESCRIPTION

In this Chapter the theoretical background regarding fluid-particles flows is given and the numerical models used are outlined. Specifically for the particulate phase, the way that the particle inertial effects are incorporated in an Eulerian formulation of the particles population balance equation is described in detail.

2.1 CONTINUOUS PHASE

2.1.1 Continuous Phase: Governing Equations

Let S be a closed surface that bounds a closed volume Ω of arbitrary shape within a finite region of the fluid flow, fixed in space with the fluid moving through it, as shown in Fig.1. In the absence of sources or sinks in the control volume Ω , the integral form of the continuity equation is written as:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f d\Omega + \int_S \rho_f \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0 \quad , \quad (2.1)$$

and the momentum equation as:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f \vec{v} d\Omega + \int_S \vec{v} \rho_f \vec{v} \cdot d\vec{S} = \sum \vec{F}_i \quad , \quad (2.2)$$

where $\vec{v} = u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}$ is the fluid velocity, ρ_f the fluid density, $d\vec{S} = \hat{n}dS$ the elemental surface with \hat{n} the normal to the surface unit vector (defined outward), $d\Omega$ the elemental volume, and $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ the Cartesian basis vectors.

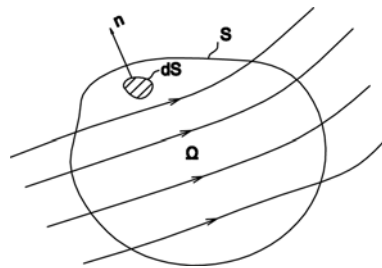


Figure 1: Generic finite computational volume.

In Eq.(2.2), $\sum \vec{F}_i$ is the sum of the forces acting on the fluid mass, which is in the volume Ω , each time. These forces can be body forces, \vec{F}_b , acting on the volume of the fluid (e.g. gravitational, electric and magnetic) and/or surface forces, \vec{F}_s , which act on the surface of the fluid. The latter are due to the pressure distribution on the surface by the surrounding fluid and the viscous shear stresses distributions imposed also by the surrounding fluid as friction (viscous forces).

Body forces can be written in the general form:

$$\vec{F}_b = \int_{\Omega} \rho_f \vec{f}_b \, d\Omega \quad , \quad (2.3)$$

where \vec{f}_b is the body force per unit mass acting on the fluid. Likewise, surface forces are given by equation:

$$\vec{F}_s = \int_S \vec{t} \, dS \quad , \quad (2.4)$$

where \vec{t} is the stress vector that is related to the stress tensor $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

through (Tsangaris, 1995):

$$\vec{t} = \boldsymbol{\sigma}^T \hat{n} \quad , \quad (2.6)$$

where $\boldsymbol{\sigma}^T$ the transpose of the stress tensor. For a Stokes fluid, the stress $\boldsymbol{\tau}$ and stress $\boldsymbol{\sigma}$ tensors are related through:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \quad , \quad (2.7)$$

where p is the pressure and \mathbf{I} the unit tensor.

Therefore, for a Stokes fluid the momentum equation (Eq.(2.2)) becomes:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f \vec{v} \, d\Omega + \int_S \vec{v} \rho_f \vec{v} \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} \rho_f \vec{f}_b \, d\Omega + \int_S (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau})^T \cdot d\vec{S} \quad . \quad (2.8)$$

Equation (2.8) is a vector relation, which in Cartesian coordinates is split into the following three scalar expressions assuming negligible body forces:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f u \, d\Omega + \int_S \rho_f u \vec{v} \cdot d\vec{S} = & - \int_S p \hat{i} \cdot d\vec{S} + \\ & \int_S (\tau_{xx} \hat{i} + \tau_{yx} \hat{j} + \tau_{zx} \hat{k}) \cdot d\vec{S} \quad , \end{aligned} \quad (2.9)$$

for the x-component,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f v \, d\Omega + \int_S \rho_f v \vec{v} \cdot d\vec{S} = & - \int_S p \hat{j} \cdot d\vec{S} + \\ & \int_S (\tau_{xy} \hat{i} + \tau_{yy} \hat{j} + \tau_{zy} \hat{k}) \cdot d\vec{S} \quad , \end{aligned} \quad (2.10)$$

for the y-component, and

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f w \, d\Omega + \int_S \rho_f w \vec{v} \cdot d\vec{S} = & - \int_S p \hat{k} \cdot d\vec{S} + \\ & \int_S (\tau_{xz} \hat{i} + \tau_{yz} \hat{j} + \tau_{zz} \hat{k}) \cdot d\vec{S} \quad , \end{aligned} \quad (2.11)$$

for the z-component. In Eqs.(2.9)-(2.11), τ_{ij} are the components of the stress tensor.

The stress tensor $\boldsymbol{\tau}$ for Newtonian fluids equals (Tsangaris, 1995):

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu_f \mathbf{D} + \mu_f^* \mathbf{I} \operatorname{tr} \mathbf{D} \quad , \quad (2.12)$$

where μ_f the fluid dynamic viscosity, μ_f^* the volume viscosity and $\operatorname{tr} \mathbf{D}$ the trace of the stress rate tensor \mathbf{D} . The latter is related to fluid velocity \vec{v} through:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\nabla^T \vec{v} + \nabla \vec{v}) = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad , \quad (2.13)$$

where

$$\begin{aligned} D_{xx} &= \frac{\partial u}{\partial x}, D_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}, D_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z} \\ D_{xy} &= D_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ D_{yz} &= D_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ D_{zx} &= D_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad . \quad (2.14)$$

Moreover, it is easily shown that $\operatorname{tr} \mathbf{D} = \nabla \cdot \vec{v}$, i.e. the trace of the stress rate tensor is equal to the deviation of the fluid velocity.

For an incompressible fluid, for which ρ_f is constant over time and space, the continuity equation (Eq.(2.1)) gives:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad . \quad (2.15)$$

Taking into account Eqs.(2.13)-(2.15), the components of the stress tensor of an incompressible, Newtonian fluid are:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2\mu_f \frac{\partial u}{\partial x}, \tau_{yy} = 2\mu_f \frac{\partial v}{\partial y}, \tau_{zz} = 2\mu_f \frac{\partial w}{\partial z} \\ \tau_{xy} &= \tau_{yx} = \mu_f \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \tau_{yz} &= \tau_{zy} = \mu_f \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \tau_{zx} &= \tau_{xz} = \mu_f \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad . \quad (2.16)$$

and momentum equations (Eqs.(2.9)-(2.11)) become:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f u \, d\Omega + \int_S \rho_f u \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{i} \cdot d\vec{S} + \\ &\int_S \mu_f \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \hat{i} + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \hat{j} + \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{k} \right] \cdot d\vec{S} \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f v \, d\Omega + \int_S \rho_f v \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{j} \cdot d\vec{S} + \\ &\int_S \mu_f \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \hat{i} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \hat{j} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \hat{k} \right] \cdot d\vec{S} \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_f w \, d\Omega + \int_S \rho_f w \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{k} \cdot d\vec{S} + \\ &\int_S \mu_f \left[\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{i} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \hat{j} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \hat{k} \right] \cdot d\vec{S} \end{aligned} \quad . \quad (2.17)$$

These equations are the Navier-Stokes equations for an incompressible Newtonian fluid in integral form. In the present study, steady-state flows are investigated, thus the first term in the left hand side of Eqs.(2.17) equals to zero, simplifying further the equations.

If u_o and ℓ are the characteristic velocity and length of a given fluid flow problem respectively, the steady-state form of Eqs.(2.17) are rendered dimensionless (same notation is retained for simplicity):

$$\begin{aligned}
\int_S u \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{i} \cdot d\vec{S} \\
&\quad + \frac{1}{\text{Re}} \int_S \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \hat{i} + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \hat{j} + \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{k} \right] \cdot d\vec{S} \\
\int_S v \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{j} \cdot d\vec{S} \\
&\quad + \frac{1}{\text{Re}} \int_S \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \hat{i} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \hat{j} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \hat{k} \right] \cdot d\vec{S} \quad , \quad (2.18) \\
\int_S w \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{k} \cdot d\vec{S} \\
&\quad + \frac{1}{\text{Re}} \int_S \left[\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \hat{i} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \hat{j} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \hat{k} \right] \cdot d\vec{S}
\end{aligned}$$

using $\rho_f u_o^2$ and u_o/ℓ for making dimensionless the pressure and the shear stress terms, respectively. In Eqs.(2.18), Re is the flow Reynolds number, defined as:

$$\text{Re} = \frac{\rho_f u_o \ell}{\mu_f} \quad , \quad (2.19)$$

which is the ratio of the inertial forces to the viscous forces into the fluid.

Throughout the present study, the mean inlet fluid velocity, v_m , and the tube diameter, d_t , serve as characteristic velocity and length, respectively.

2.1.2 Continuous Phase: Numerical Solution

The Navier-Stokes equations for the three-dimensional incompressible flow field of the carrier fluid are solved numerically using the in-house CFD code *CADBA*, which stands for 'Computational Algorithm for Diagnosis of Biofluid flow Abnormalities'. The code is based on the methodology proposed by [Ferziger and Perić \(2002\)](#) and developed by [Neofytou \(2005\)](#); [Neofytou and Tsangaris \(2006\)](#). It has been validated in different flow conditions and its basic features are outlined next.

The code incorporates the finite-volume method on multi-block, collocated, body-fitted 3D grids, where grid non-orthogonality is taken into account. Apart from Newtonian, the code incorporates also generalized Newtonian and viscoelastic (Oldroyd-B) models.

In order to address the problem of pressure indeterminacy and guarantee that the fluid velocity field satisfies the continuity equation, a pressure correction equation is derived by the continuity equation and is used in conjunction with the Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations (SIMPLE) ([Patankar, 1980](#)) in the code. SIMPLE is an iterative method for the coupled velocity-pressure problems. Starting with an initial guess of the flow field, Navier-Stokes equations are solved for the velocity field, then the pressure field is corrected using the pressure correction equation and the velocities are updated. These updated values of the velocities and pressure satisfy the continuity equation, but not necessarily the momentum equations. Thus, the procedure is repeated with the updated field values, until the obtained solution satisfies both the continuity and momentum equations within a desired accuracy.

Momentum equations (Eqs.(2.17)) are discretized in *CADBA* using a first-order forward Euler scheme for the time dependent term, a third-order QUICK scheme for the convective term and a central difference scheme (CDS) of second-order for the diffusion (viscous) term, whereas the pressure term is treated as source (Ferziger and Perić, 2002). The resulting linear equations system is solved iteratively by SIP (Strongly Implicit Procedure), an incomplete LU decomposition method proposed by Stone (1968).

In the present study, solution is reached assuming incompressible Newtonian fluid, laminar flow, constant fluid properties and one-way coupling, i.e. the influence of the particulate phase on the hydrodynamic field of the carrier fluid is considered negligible. Moreover, constant velocity profile and pressure are assumed at the inlet and non-slip condition at the walls, whereas at the outlet both the velocity and pressure are extrapolated from the values at the adjacent inner nodes. The velocity profile at the inlet is that of a fully developed flow in a straight duct of circular cross-section, which for Newtonians flows can be analytically obtained. In this case, the (parabolic) velocity profile is given in dimensionless form by the following equation:

$$v|_{\text{inlet}} = 2 \left[1 - \left(\frac{r}{r_t} \right)^2 \right], 0 \leq r \leq r_t, \quad (2.20)$$

where $r_t = d_t/2$ is the tube radius.

2.2 DISPERSED PHASE

2.2.1 Dispersed Phase: General Theoretical Remarks

Particle concentration in terms of number or mass per unit volume of the carrier fluid is a fundamental quantity in the description of aerosol flows. Equally important property is the particle size that is the determining factor of the system behavior in the majority of the applications. Other properties, which may become crucial under different conditions, are particle shape because it affects various physicochemical properties, chemical composition especially in reactive or toxicology related flows and/or particle electrical charge that for example affects the design of electrostatic filters.

When a particle can be regarded spherical, particle diameter, d_p , is used most often as representative size. However, there are many cases where the shape of the particles is irregular. Then an equivalent diameter is usually employed, which is the diameter that a spherical particle should have in order to present the same behavior based on a predecided criterion. The most widely used equivalent diameter is the aerodynamic diameter, defined as the diameter of a spherical particle of unit density (1000 kg/m^3) that has the same settling velocity as the real particle. Stokes diameter is also frequently used, which is the diameter of a spherical particle with the same density and settling velocity as the real particle.

The particle size in aerosols spans over multiple size orders; from a few nanometers ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) to several micrometers ($1 \text{ }\mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}$). Based on their size, particle are divided in coarse ($d_p > 2 \text{ }\mu\text{m}$ or $1 \text{ }\mu\text{m}$ depending on the researcher) and fine ($d_p < 2 \text{ }\mu\text{m}$ or $1 \text{ }\mu\text{m}$). Fine particles are further divided into those that result from nucleation ($d_p < 0.1 \text{ }\mu\text{m}$) and those produced by accumulation ($0.1 \text{ }\mu\text{m} < d_p < 2 \text{ }\mu\text{m}$). Finally, an other classification used frequently due to the advances in nanotechnology is nanoparticles, for which $d_p < 50 \div 100 \text{ nm}$.

Particle size may affect not only the characteristics of an aerosol, but the physical laws that describe its behavior too. The ratio of the mean free path, λ , of the carrier gas to the particle diameter, $d_p/2$, defines a dimensionless number called Knudsen number:

$$Kn = \frac{2\lambda}{d_p} . \quad (2.21)$$

Knudsen number is a criterion for mass, momentum and heat transfer between the particles and the surrounding gas and based on it, two major limiting regimes are defined; *a*) the continuum regime, for $Kn \ll 1$ or $\lambda \ll d_p$, where the gas is regarded a continuous medium, and *b*) the free molecular regime, for $Kn \gg 1$ or $\lambda \gg d_p$, where the gas continuity does not hold. . In the first case, Navier-Stokes equations are used to calculate the drag force on the particle, whereas in the second case, the kinetic theory of gases should be implemented. Between these two regimes, there is a transition regime, where the theory is not fully developed and various interpolation methods are used.

In practical applications particle population is non-uniform with respect to size. Therefore, statistical methods are used to describe the particle size distribution, such as the mean value and the variance. As a convention, we can assume single sized particles (monodispersed) when the standard deviation of the size distribution is less than 10%. Otherwise, a distribution extending in more than one particle sizes (polydispersed) should be considered. Most of the naturally occurring and engineered particles fall into the latter category.

In modelling, particle size distribution two basic approaches are used; *a*) discrete or *b*) continuous . In the former, the size range is split into size intervals (called 'size bins') each represented by a specific value of the size and all particles are counted and divided by the total number of particles. The results are visualized in plots (histograms) like the one shown in Fig.2(a) and comprise the discrete probability density function (PDF) for the particle size. The continuous PDF is obtained when the size of the intervals tends to zero, i.e. when their number tends to infinity (Fig.2(b)).

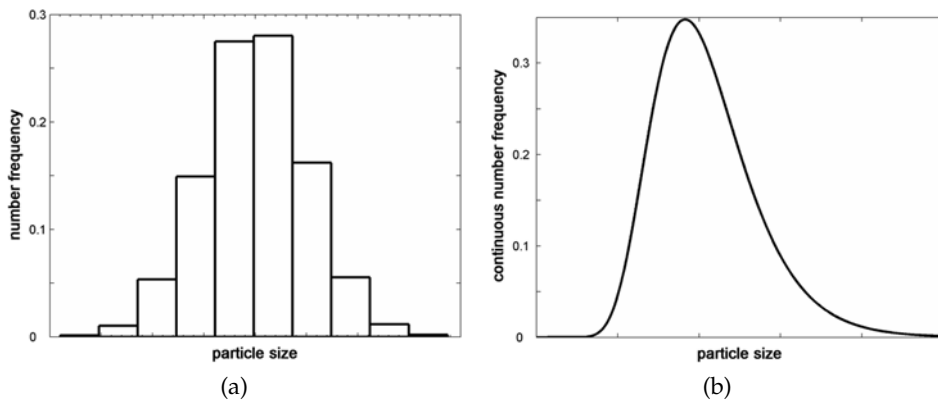


Figure 2: Example of discrete (a) and continuous (b) particle size distributions (adapted from Crowe and Michaelides (2006)).

Based on the continuous particle size distribution, a very useful family of equations are defined, the so called moments of the size distribution. If $n(v; \vec{r}, t)$ is the number

concentration of particles with volumes in the range from v to $v + dv$ at position \vec{r} and time t , then the general form of j -th order moment, M_j is (Drossinos and Housiadas, 2006):

$$M_j(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} dv v^j n(v; \vec{r}, t) \quad . \quad (2.22)$$

Moments are related to the particle population characteristics; the zeroth moment M_0 equals the total number concentration $N(\vec{r}, t)$, the first moment gives the average particle diameter, $\bar{d}_p = M_1(\vec{r}, t)/M_0(\vec{r}, t)$, the second moment provides the average particle surface area, $\bar{S}_p = \pi M_2(\vec{r}, t)/M_0(\vec{r}, t)$, and finally the third moment gives the average volume per particle $\bar{V}_p = \pi M_3(\vec{r}, t)/6M_0(\vec{r}, t)$.

Depending on the particular application, particle concentration other than number may be more descriptive. In filters, for example, particle mass concentration is more suitable as mass is the measured quantity, whereas surface concentration is more appropriate in chemically reactive flows. In these cases the PDF for particle size in terms of mass or surface is used instead.

2.2.2 Dispersed Phase: General Dynamic Equation

The variation in space and time of the particle size distribution under various physical processes is of utmost importance in the study of aerosol flows. There are two categories of processes that may alter the size distribution of an aerosol in a fixed elemental volume; *a*) internal processes, such as coagulation or agglomeration and gas-to-particle conversion, and *b*) external processes, such as convection and transport due to gradients in the fluid (e.g. temperature, concentration), as well as external forces (e.g. gravity, electromagnetic) . The integrodifferential equation that describes the effect of these phenomena on the particle size distribution is called the General Dynamic Equation (GDE). Given appropriate initial and boundary condition, GDE describes fully the particle size distribution in an aerosol flow.

In the presence of fluid flow, the GDE is given by (Drossinos and Housiadas, 2006):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \vec{v}_p) = \frac{\partial n}{\partial t} \Big|_{g-p} + \frac{\partial n}{\partial t} \Big|_{c-a} \quad , \quad (2.23)$$

where $n(v; \vec{r}, t)$ the number concentration of particles with volume between v and $v + dv$ and \vec{v}_p the average particle velocity. Particle volume, v , is chosen as an independent variable in the particle size distribution, n , instead of its diameter, d_p , because it is conserved during coagulation/agglomeration. This expression of the particle size distribution is adequate for single-species, spherical particles, which is of interest in the present study. It should be noted, however, that if particle morphology is of importance, then additional variables describing the shape should be introduced. Moreover, in the case of chemically reactive flows, further descriptors are required to properly account for multicomponent aerosol particles.

In Eq.(2.23), the first term of the left-hand-side (LHS) refers to particle accumulation in time and the second to particle transport due to external processes, whereas the right-hand-side (RHS) represents the internal processes; the first term corresponds to gas-to-particle conversion and the second to coagulation or agglomeration. The different internal and external processes will be discussed next.

Internal Processes

Gas-to-particle conversions is a term used to refer in total to distinct aerosol processes that take place when physical or chemical processes in the gas allow the formation of unstable, saturated vapor. These processes alter not only the particle size distribution but their mass concentration as well, because the vapor reaches a new state of equilibrium either by forming new particles or by condensing on preexisting particles, thus altering the size distribution. In the first case, there is formation of new particles either by condensation of the molecules of supersaturated vapor themselves (homogeneous nucleation) or by condensation of vapor molecules in the presence of solid surface which may occur at low saturation ratios (heterogeneous nucleation). In the second case, supersaturated vapor changes the size of existing aerosol particles. Whether the particle size increases (condensation) or decreases (evaporation) depends on the local thermodynamic conditions.

Relative motion of particles suspended in a fluid leads to collisions, which in turn may result to the formation of new particles either by agglomeration, where the identity and shape of the primary particles are preserved, or by coagulation, where the primary particles loose completely their characteristics. Various phenomena drive the relative motion between the particles; *a*) Brownian diffusion, *b*) laminar shear or turbulence in the fluid, and *c*) influence of external force fields (e.g. gravity, electrostatic and van der Waals). Coagulation (or agglomeration) results in decreased particle number concentration, while increases particle size. Nevertheless, the total particle mass is conserved during these processes as opposed to gas-to-particle conversion processes.

As internal processes are not taken into consideration in the present study, further examination of these mechanisms is not included here. Extensive analysis of the different internal processes can be found in [Friedlander \(2000\)](#); [Hinds \(1999\)](#); [Seinfeld and Pandis \(1998\)](#); [Drossinos and Housiadas \(2006\)](#).

External Processes

The external processes are those that change the particle size distribution, $n(\nu; \vec{r}, t)$, by transport of particles across the boundaries of the elemental volume. Different phenomena influence the motion of a particle that is suspended in a fluid, whether the fluid is still or flowing. The driving mechanisms of particle's motion may cause its transport within the fluid both across the elemental volume boundaries or towards a surface where they may deposit. Thus these mechanisms are frequently referred to as deposition mechanisms. In the following sections, several deposition mechanisms will be described and it will be shown how these are incorporated in the GDE to account for particle transport and deposition in aerosol flows.

2.2.3 *Dispersed Phase: Deposition Mechanisms*

Lets consider the motion of a single spherical particle of diameter d_p in a viscous fluid. The force needed to move this particle through the fluid is called drag force, \vec{F}_D , the direction of which is that of the fluid-particle relative velocity, $\vec{v} - \vec{v}_p$, and its magnitude is given by the general form of the Newton's resistance equation ([Hinds, 1999](#)):

$$F_D = C_D \frac{\pi}{8} \rho_f d_p^2 |\vec{v} - \vec{v}_p|^2 \quad . \quad (2.24)$$

In the above equation, C_D is a dimensionless quantity known as drag coefficient and is a function of the particle Reynolds number:

$$\text{Re}_p = \frac{\rho_f d_p |\vec{v} - \vec{v}_p|}{\mu_f} . \quad (2.25)$$

In analogy to the fluid flow Reynolds number (Eq.(2.19)), Re_p is the ratio of the inertial forces to the viscous forces exerted on the particle. When the inertial forces dominate the particle motion, that is for $1000 < \text{Re}_p < 2 \times 10^5$, the drag coefficient is nearly constant and equal to $C_D = 0.44$ (Newton's law region). However, for $\text{Re}_p < 1000$, drag coefficient depends on the particle Reynolds number, i.e. $C_D = f(\text{Re}_p)$. For Re_p in the range of 1 to 1000, the following relationship is used for the drag coefficient (Hinds, 1999; Seinfeld and Pandis, 1998):

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_p} (1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687}) . \quad (2.26)$$

In cases where the inertial forces are negligible compared to the viscous forces, Stokes (1851) showed that the drag force exerted on the particle by the fluid equals:

$$F_D = 3\pi \mu_f d_p |\vec{v} - \vec{v}_p| . \quad (2.27)$$

Consequently, the drag coefficient is given by:

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_p} , \quad (2.28)$$

i.e. it is inversely proportional to the particle Reynolds number. Equation (2.27) is known as Stokes law. Negligible inertial compared to viscous forces implies low particle Reynolds number and laminar fluid flow. These conditions apply for most aerosol flows, including those of interest here, where the particle size is small and the velocities low.

Derivation of Eq.(2.27) is based on various assumptions, apart from the low Re_p ; *a*) the fluid is incompressible, *b*) there are no walls or other particles near, *c*) the particle is rigid, and *d*) no-slip condition for the fluid velocity applies on the particle surface. Some explanations are in order here. The first assumption implies that the particle does not alter significantly the density of the surrounding air as it moves, rather than the air being an incompressible fluid. Moreover, the absence of a solid surface (either a wall or another particle) in the vicinity of the moving particle guarantees that the drag force will not change because of the distortion of the fluid streamlines near the solid surface. Finally, the effect of particle rigidity on the drag force is seldom important, thus it can be considered as solid in practice. For dilute aerosol flows the first three assumptions hold true and the Stokes law can be used for the drag force exerted on the particle.

The last assumption, however, regarding the fluid velocity no-slip condition on the particle surface, implies that the Stokes law (Eq.(2.27)) is valid only when the gas can be regarded as a continuous medium. As the particle size reduces and approaches the mean free path of the gas, the relative velocity on the particle surface is no longer zero and the gas elements 'slip' on the particle surface, resulting in a decreased drag force.

In order to address this issue, a correction factor is introduced in Stokes law, which now becomes:

$$F_D = \frac{3\pi \mu_f d_p |\vec{v} - \vec{v}_p|}{C_c} . \quad (2.29)$$

The correction factor is given by (Hinds, 1999):

$$C_c = 1 + \frac{\lambda}{d_p} \left[2.34 + 1.05 \exp \left(-0.39 \frac{d_p}{\lambda} \right) \right] , \quad (2.30)$$

and is called slip correction factor or Cunningham correction factor. Equation (2.30) shows that $C_c \geq 1$ always. For air, the mean free path is related to its pressure p (kPa) and temperature T (K) through (Drossinos and Housiadas, 2006):

$$\lambda_{\text{air}} = \lambda_{\text{ref}} \left(\frac{101}{p} \right) \left(\frac{T}{293} \right) \left(\frac{1 + 110/293}{1 + 110/T} \right) , \quad (2.31)$$

where $\lambda_{\text{ref}} = 0.0664 \mu\text{m}$ the mean free path of air at standard conditions, i.e. $p = 101 \text{ kPa}$ and $T = 293 \text{ K}$. In Fig.3, Cunningham factor versus particles diameter d_p is shown for spherical particles of standard density ($\rho_p = 1000 \text{ kg/m}^3$) suspended in air at standard conditions.

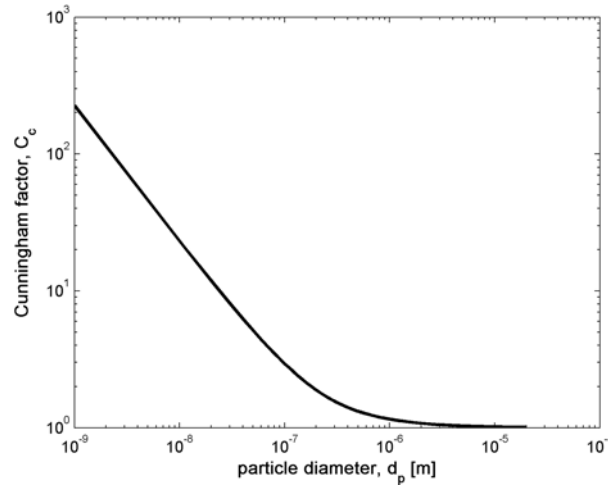


Figure 3: Cunningham factor for spherical particles of standard density suspended in air at standard conditions.

Diffusion

Aerosol particles experience continuous collisions with the molecules of the carrier fluid. As a result, the particle move randomly and this motion is called Brownian motion. Macroscopically, this movement manifests as flow of particles from high particle concentration regions to low which is known as diffusion and is described by Fick's law. That is, if \vec{J}_p is the flux and D a diffusion coefficient, then:

$$\vec{J}_p = -D \nabla n \quad . \quad (2.32)$$

The diffusion coefficient of particles is given by the Stokes-Einstein equation corrected by the Cunningham factor:

$$D = \frac{k_B T_f C_c}{3\pi\mu_f d_p} , \quad (2.33)$$

where $k_B = 1.381 \times 10^{-23}$ J/K is the Boltzmann's constant and T_f the fluid temperature. The diffusion coefficient depends both on the fluid properties and the particle size. From Eq.(2.33) it is clear that diffusion becomes important as particle size reduces.

Gravitational Settling

The velocity that a particle acquires due to the effect of gravity equals (Drossinos and Housiadas, 2006):

$$\vec{v}_s = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p}\right) \vec{g} \quad , \quad (2.34)$$

with \vec{g} the acceleration of gravity, and the corresponding deposition mechanism is called gravitational settling or sedimentation. In the majority of aerosol flows it holds that $\rho_f \ll \rho_p$, and if slip correction is also taken into account, Eq.(2.34) becomes:

$$\vec{v}_s = \frac{\rho_p d_p^2 C_c}{18\mu_f} \vec{g} \quad . \quad (2.35)$$

Settling velocity increases rapidly with increasing particle size, as it is proportional to the square of the particle diameter.

Inertial Impaction

Impaction is a crucial deposition mechanism, present in many industrial (e.g. size classifiers, filters) and biological (respiratory deposition) processes. Suspended particles do not always follow closely the streamlines of the accelerating carrier fluid, because of their own inertia. As a result they may hit and deposit on surrounding surfaces.

A parameter that characterizes the response of particles to fluid flow changes is the particle relaxation time, τ_p , which is defined as the time a particle of diameter d_p and density ρ_p needs to acquire its terminal velocity, if it released in a still fluid of viscosity μ_f . These quantities are related through (Drossinos and Housiadas, 2006):

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2 C_c}{18\mu_f} \quad , \quad (2.36)$$

i.e. the particle relaxation time is a function of the fluid properties, through the viscosity and the Cunningham factor, in addition to those of the particle (density and diameter). Substitution in Eq.(2.35), shows that $\vec{v}_s = \tau_p \vec{g}$. In analogy, the velocity \vec{v}_p of a particle subjected to a force \vec{F} is given by:

$$\vec{v}_p = \tau_p \frac{\vec{F}}{m_p} \quad , \quad (2.37)$$

where m_p the mass of single particle.

Another parameter that describes the extent to which a particle continue its initial motion while the fluid flow changes, is the stop distance defined by:

$$S_L = u_o \tau_p \quad , \quad (2.38)$$

where u_o the initial velocity of the particles. The stop distance is an indication of how far a particle with initial velocity u_o will travel into a still fluid before it stops.

Finally, a very useful dimensionless number in the study of particle inertial effects is the Stokes number, which is defined as the ratio of the stop distance to a characteristic length of the fluid flow or, equivalently, the ratio of the particle relaxation time to a characteristic time of the flow:

$$St = \frac{S_L}{L} = \frac{\tau_p}{L/u_o} = \frac{\rho_p d_p^2 C_c u_o}{18\mu_f L} \quad (2.39)$$

Stokes number is a criterion used extensively to characterize how easily a particle adjust to changes of the fluid flow; $St \ll 1$ indicates particles that follow closely the fluid streamlines - thus impaction is not an important deposition mechanism for these particles, whereas high Stokes numbers ($St > 1$) indicates particles that deviate from the fluid streamlines and impact on surfaces.

From both Eqs.(2.36) and (2.39) it is evident that the bigger the particle, the stronger the inertial effects. Empirically it is found that impaction should be always considered as a deposition mechanism for particles with diameters greater than $1\mu\text{m}$.

2.2.4 Dispersed Phase: Transport and Deposition of Particles

Consider a monodispersed population of spherical particles, each of diameter d_p and mass m_p , which is dispersed in a flowing incompressible fluid. If the internal processes are not taken into account, therefore particle size and total number remain constant, then at position \vec{r} and time t the particle number concentration will be $n(\vec{r}, t)$. The GDE (Eq.(2.23)) becomes:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \vec{v}_p) = 0 \quad , \quad (2.40)$$

where it is reminded that $\vec{v}_p(\vec{r}, t)$ is the particle velocity. In order to distinguish the above equation that ignores the aerosol internal processes from the GDE, from now it will be referred to as particle Population Transport Equation (PTE). It is clear that PTE can be solved for the particle concentration, provided that the particle velocity is known.

Adopting a two-fluid methodology for the fluid-particle system, it will be shown next how one can obtain the average particle velocity \vec{v}_p under different conditions without solving the average particle momentum equation.

Aerosol particles are the dispersed phase into a continuous phase (fluid). When the dispersed phase is dilute enough it is reasonable to assume that the particles do not interact with each other. However, they do interact with the carrier fluid and with external force fields, if present. Consequently, if the force per unit mass exerted on the particles by the fluid is denoted by $\vec{F}_f(\vec{r}, t)$ and the one exerted by the external fields by $\vec{F}_{ext}(\vec{r}, t)$, then the continuity equation for the dispersed phase is given by:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \vec{v}_p) = 0 \quad , \quad (2.41)$$

and the corresponding average momentum equation by:

$$\frac{\partial \vec{v}_p}{\partial t} + \vec{v}_p \cdot \nabla \vec{v}_p = \frac{1}{c} \nabla \cdot \Pi_p + \vec{F}_f + \vec{F}_{ext} \quad , \quad (2.42)$$

where $c(\vec{r}, t) = m_p n(\vec{r}, t)$ the particle mass concentration and Π_p the stress tensor of the particles. In order to proceed, the forms of the stress tensor Π_p and the fluid-particle force \vec{F}_f need to be specified.

Since the aerosol particles do not interact with each other, the dispersed phase may be regarded as an ideal gas, the local temperature of which equals that of the fluid, $T_f(\vec{r}, t)$, and is subjected to a force field equal to $\vec{F}_f(\vec{r}, t) + \vec{F}_{ext}(\vec{r}, t)$. If in addition, the particle viscous stresses are neglected, then the particle stress tensor is written as:

$$\Pi_p = -I p_p \quad , \quad (2.43)$$

where the dispersed phase partial pressure, p_p , is given by the law for ideal gases:

$$p_p(\vec{r}, t) = n(\vec{r}, t) k_B T_f(\vec{r}, t) = \frac{k_B}{m_p} c(\vec{r}, t) T_f(\vec{r}, t) \quad . \quad (2.44)$$

The pressure term in the momentum equation (Eq.(2.42)), thus, is written as:

$$\frac{1}{c} \nabla \cdot \Pi_p = \frac{1}{c} \nabla \cdot (-I p_p) = -\frac{1}{c} \nabla \left(\frac{k_B T_f}{m_p} c \right) \quad . \quad (2.45)$$

In the majority of the biological flows, as those of interest here, it is fairly reasonable to assume constant temperature, i.e. isothermal flow, which simplifies Eq.(2.45):

$$\frac{1}{c} \nabla \cdot \Pi_p = -\frac{k_B T_f}{m_p} \frac{1}{c} \nabla c = -\frac{k_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \quad . \quad (2.46)$$

According to [Ramshaw \(1979\)](#), a general expression for the force field \vec{F}_f in case of Brownian particles is:

$$\vec{F}_f(\vec{r}, t) = \beta_p (\vec{u} - \vec{v}_p) - (1/\rho_p) \nabla p - (\eta/m) \nabla \ln T_f + \vec{F}_V(\vec{r}, t) + \vec{F}_B(\vec{r}, t) \quad , \quad (2.47)$$

where $\beta_p = 1/\tau_p$ the inverse particle relaxation time, $p(\vec{r}, t)$ the pressure of the fluid-particle system, η the thermal diffusion coefficient. The last two terms of the RHS in Eq.(2.47) represent the virtual mass force and the Basset-Bousinesq force, respectively. These are unsteady forces due two the acceleration of the particle into the fluid. The virtual (or added) mass force represents the force needed to accelerate the continuous phase in the immediate vicinity of a particle when the phases relative velocity changes and is given by:

$$\vec{F}_V(\vec{r}, t) = \frac{\rho_f}{2\rho_p} [\dot{\vec{v}}(t) - \dot{\vec{v}}_p(t)] \quad , \quad (2.48)$$

where $\dot{\vec{v}}(t)$, $\dot{\vec{v}}_p(t)$ the total derivatives of \vec{v} and \vec{v}_p along the particle trajectory, respectively. On the other hand, the Basset-Bousinesq force is given by:

$$\vec{F}_B(\vec{r}, t) = \left[\frac{9}{2\pi} \frac{\rho_f}{\rho_p} \beta_p \right]^{1/2} \times \int_{-\infty}^t dt' [t - t']^{-1/2} [\dot{\vec{v}}(t) + \dot{\vec{v}}_p(t)] \quad , \quad (2.49)$$

This force accounts for viscous effects and represents the delay in the development of the layer around the particle as the relative velocity changes in time.

Both the virtual mass and the Basset-Bousinesq forces become significant in accelerating aerosol flows only when the fluid density, ρ_f , is at least of the same order of magnitude as or greater than the particle density, ρ_p (e.g. water droplets in oil). Otherwise, that is

when $\rho_p \gg \rho_f$ as in most aerosol flows, these forces can be neglected. In the present study these unsteady forces are not taken into account and they will be dropped out of the analysis from now on.

The second term in Eq.(2.47) accounts for the pressure-gradient force exerted on the particle due to local pressure gradients around the particle. The force is important when large pressure-gradients exist in the flow and the particle density is smaller than or equal to the fluid density. Therefore, for the cases under examination here, where as already stated $\rho_p \gg \rho_f$, the contribution of the pressure-gradient force is of no importance.

Finally, the isothermal flow assumption for the biological flows means that the thermophoretic term in Eq.(2.47), $\eta \nabla \ln T_f$, vanishes as well.

Taking all these observations into account, the expression for the fluid-particle interaction force field reduces to the drag force, that is:

$$\vec{F}_f(\vec{r}, t) = \frac{1}{\tau_p} (\vec{u} - \vec{v}_p) \quad , \quad (2.50)$$

Regarding the external force term in the momentum equation (Eq.(2.42)), the total external force per unit mass based on Eq.(2.37) will cause the particle movement with velocity equal to:

$$\vec{F}_{\text{ext}} = \frac{1}{\tau_p} \vec{v}_{\text{ext}} \quad . \quad (2.51)$$

Incorporation of Eqs.(2.46), (2.50) and (2.51) in the momentum equation yields:

$$\frac{\partial \vec{v}_p}{\partial t} + \vec{v}_p \cdot \nabla \vec{v}_p = -\frac{k_B T_f}{m_p} \nabla \ln c + \frac{1}{\tau_p} (\vec{u} - \vec{v}_p) + \frac{1}{\tau_p} \vec{v}_{\text{ext}} \quad . \quad (2.52)$$

In order to address the effect of inertia on Brownian diffusion [Fernandez de la Mora and Rosner \(1982\)](#), proposed a first-order correction to particle velocity due to particle inertia. This is achieved through a low particle relaxation time τ_p expansion of the particle momentum equation in the case of isothermal, steady-state aerosol flows. Equation (2.52) is now written as:

$$\tau_p \vec{v}_p \cdot \nabla \vec{v}_p = \vec{u} - \vec{v}_p - \frac{k_B T_f}{m_p} \tau_p \nabla \ln c + \vec{v}_{\text{ext}} \quad . \quad (2.53)$$

If the particle velocity is written as:

$$\vec{v}_p = \vec{v}_p^{(0)} + \tau_p \vec{v}_p^{(1)} + O(\tau_p^2) \quad , \quad (2.54)$$

as proposed by [Fernandez de la Mora and Rosner \(1982\)](#), then neglecting higher order terms Eq.(2.53) becomes:

$$\begin{aligned} \tau_p \left[\vec{v}_p^{(0)} + \tau_p \vec{v}_p^{(1)} \right] \cdot \nabla \left[\vec{v}_p^{(0)} + \tau_p \vec{v}_p^{(1)} \right] = \\ \vec{u} - \left[\vec{v}_p^{(0)} + \tau_p \vec{v}_p^{(1)} \right] - \frac{k_B T_f}{m_p} \tau_p \nabla \ln c + \vec{v}_{\text{ext}} \quad . \end{aligned} \quad (2.55)$$

The term at the LHS is expanded as:

$$\begin{aligned} & \tau_p \left[\vec{v}_p^{(0)} + \tau_p \vec{v}_p^{(1)} \right] \cdot \nabla \left[\vec{v}_p^{(0)} + \tau_p \vec{v}_p^{(1)} \right] = \\ & \tau_p \left[\vec{v}_p^{(0)} \cdot \nabla \vec{v}_p^{(0)} + \tau_p \vec{v}_p^{(0)} \cdot \nabla \vec{v}_p^{(1)} + \tau_p \vec{v}_p^{(1)} \cdot \nabla \vec{v}_p^{(0)} + \tau_p^2 \vec{v}_p^{(1)} \cdot \nabla \vec{v}_p^{(1)} \right] \end{aligned} \quad (2.56)$$

Equation (2.53) can, thus, be rearranged as follows:

$$\begin{aligned} & \tau_p^3 \left[\vec{v}_p^{(1)} \cdot \nabla \vec{v}_p^{(1)} \right] + \\ & \tau_p^2 \left[\vec{v}_p^{(0)} \cdot \nabla \vec{v}_p^{(1)} + \vec{v}_p^{(1)} \cdot \nabla \vec{v}_p^{(0)} \right] + \\ & \tau_p^1 \left[\vec{v}_p^{(1)} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} + \frac{k_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \right] + \tau_p^0 \left[\vec{v}_p^{(0)} - \vec{v} - \vec{v}_{ext} \right] = 0 \end{aligned} \quad (2.57)$$

The terms of 2nd order or higher can be neglected. As a result, from the zeroth-order term (τ_p^0) we obtain that:

$$\vec{v}_p^{(0)} = \vec{v} + \vec{v}_{ext} \quad , \quad (2.58)$$

whereas from the first-order term (τ_p^1) we get that:

$$\vec{v}_p^{(1)} = -\vec{v} \cdot \nabla \vec{v} - \frac{k_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \quad . \quad (2.59)$$

Therefore the particle velocity field (Eq.(2.54)) equals:

$$\vec{v}_p = \vec{v} + \vec{v}_{ext} - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} - D \nabla \ln c + O(\tau_p^2) \quad , \quad (2.60)$$

because:

$$\frac{k_B T_f}{m_p} \tau_p = \frac{k_B T_f}{\rho_p \frac{1}{6} \pi d_p^3} \frac{\rho_p d_p^2 C_c}{18 \mu_f} = \frac{k_B T_f C_c}{3 \pi \mu_f d_p} = D \quad .$$

The third term of Eq.(2.60) implies that the particle velocity field is compressible for inertial particles regardless the presence of diffusion and the compressibility of the carrier fluid.

The particle velocity is, thus, decomposed into two parts: a diffusive part, dependent only on the particle concentration gradient, and a convective part \vec{v}_c , independent of particle concentration. In particular, the convective particle velocity

$$\vec{v}_c = \vec{v} + \vec{v}_{ext} - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \quad , \quad (2.61)$$

depends only on the fluid velocity and its spatial gradients and it incorporates the effects of particle inertia and external force fields.

The low- τ_p expansion of the particle velocity decouples the mass and momentum conservation equations for the dispersed phase. Therefore, the dispersed-phase mass conservation Eq.(2.41), under steady-state conditions that are of interest here, takes the form of a modified steady-state convective diffusion equation:

$$\nabla \cdot [c (\vec{v}_c - D \nabla \ln c)] = 0 \quad , \quad (2.62)$$

or equivalently:

$$\nabla \cdot (c \vec{v}_c) = \nabla \cdot (D \nabla c) \quad , \quad (2.63)$$

because $c \nabla \ln c = \nabla c$. In view of Eq.(2.61), Eq.(2.63) can be further written in terms of the fluid and external velocities:

$$\nabla \cdot [c (\vec{v} + \vec{v}_{\text{ext}} - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v})] = \nabla \cdot (D \nabla c) \quad . \quad (2.64)$$

Equations (2.63) or (2.64) are the extended particle transport equations (EPTs) that incorporate the effects of particle convection, inertia, and diffusion as well as the effect of external force fields in an Eulerian formalism to first order in the particle relaxation time.

In integral form of Eq.(2.63) becomes:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (c \vec{v}_c) \, d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (D \nabla c) \, d\Omega \quad , \quad (2.65)$$

which is simplified using Gauss theorem to:

$$\int_S c \vec{v}_c \cdot d\vec{S} = D \int_S \nabla c \cdot d\vec{S} \quad , \quad (2.66)$$

or equivalently:

$$\int_S c (\vec{v} + \vec{v}_{\text{ext}} - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v}) \cdot d\vec{S} = D \int_S \nabla c \cdot d\vec{S} \quad , \quad (2.67)$$

where in addition constant fluid and particles properties, thus constant diffusion coefficient, are assumed.

Herein, we focus on flow of fluid-particles systems into tubes (internal flows). The tube diameter d_t , the mean fluid velocity at the tube inlet u_o and the mean particle mass concentration at the tube inlet c_o , are thus chosen to render Eq.(2.66) dimensionless. The following relationships hold for the various quantities:

$$\begin{aligned} c &= c_o c' \\ \vec{r} &= d_t \vec{r}', \quad \vec{S} = d_t^2 \vec{S}', \quad \nabla = \frac{1}{d_t} \nabla' \\ \vec{v} &= u_o \vec{v}', \quad \vec{v}_{\text{ext}} = u_o \vec{v}'_{\text{ext}} \\ \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} &= \frac{u_o^2}{d_t} \vec{v}' \cdot \nabla' \vec{v}' \end{aligned} \quad . \quad (2.68)$$

These equations are incorporated into Eq.(2.67), which after a few manipulations becomes:

$$\int_S c' \left[\vec{v}' + \vec{v}'_{\text{ext}} - \frac{\tau_p}{d_t/u_o} \vec{v}' \cdot \nabla' \vec{v}' \right] \cdot d\vec{S}' = \frac{D}{d_t u_o} \int_S \nabla' c' \cdot d\vec{S}' \quad . \quad (2.69)$$

However, the coefficient of the inertial term equals the particle Stokes number (see also Eq.(2.39)), defined using the chosen characteristic length and velocity:

$$\text{St} = \frac{\tau_p u_o}{d_t} \quad , \quad (2.70)$$

whereas the coefficient of the diffusive term is the inverse of the dimensionless mass Peclet number, which is defined by:

$$\text{Pe} = \frac{d_t u_o}{D} \quad , \quad (2.71)$$

and is the ratio of the convective flux to the diffusive flux of particles. As Pe increases the convective flux becomes more important than the diffusive one and vice versa. Note that high Peclet numbers implies low diffusion coefficient and, consequently, bigger particles for the same geometry and flow conditions.

Finally, the particle transport equation in integral and dimensionless form is written as (for simplicity the ' are omitted):

$$\int_S c [\vec{v} + \vec{v}_{ext} - St \vec{v} \cdot \nabla \vec{v}] \cdot d\vec{S} = Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\vec{S} \quad , \quad (2.72)$$

or expressed in terms of the (dimensionless) particle convective velocity as:

$$\int_S c \vec{v}_c \cdot d\vec{S} = Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\vec{S} \quad , \quad (2.73)$$

with $\vec{v}_c = \vec{v} + \vec{v}_{ext} - St \vec{v} \cdot \nabla \vec{v}$. The extended particles transport equation written in the form of Eq.(2.73) resembles the usual convective diffusion equation and, thus, it can be numerically treated similarly.

2.2.5 Dispersed Phase: Boundary Conditions

For all cases of fluid-particle flows in the present study, at the inlet a plug concentration particle profile is used (inlet concentration of unity in dimensionless form), i.e.:

$$c|_i = 1 \quad . \quad (2.74)$$

The particle concentration wall boundary condition was the usual condition of a totally absorbing wall:

$$c|_w = 0 \quad , \quad (2.75)$$

which at the wall boundary gives a (dimensionless) diffusive flux, $J^d|_w$, equal to:

$$J^d|_w = -Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\vec{S}|_w \quad . \quad (2.76)$$

Moreover, there is a finite non-zero particle convective velocity just before the wall, due to the external forces (Eq.(2.73)), resulting to a (dimensionless) convective flux, $J^c|_w$, which can be written as:

$$J^c|_w = \begin{cases} 0 & \text{if } \vec{v}_c \cdot d\vec{S}|_w \leq 0 \\ \int_S c \vec{v}_c \cdot d\vec{S}|_w & \text{if } \vec{v}_c \cdot d\vec{S}|_w > 0 \end{cases} \quad , \quad (2.77)$$

where the particle convective velocity, \vec{v}_c , is calculated just before the wall boundary, i.e. at the computational grid point closest to the wall. Hence, if the convective flux at the grid point closest to the wall is towards the wall, this flux is taken equal to the depositing convective flux at the wall; otherwise, the convective flux at the wall is zero. The two cases of Eq.(2.77) indicate that only outward fluxes are permitted; influx of particles from

the wall is not permitted, because is physically unrealistic in the present study. Therefore, the total (dimensionless) deposition flux becomes:

$$J_{\text{dep}} = J^c|_w + J^d|_w \quad . \quad (2.78)$$

Longest and collaborators (Longest and Oldham, 2008; Xi and Longest, 2008a,b) used Eq.(2.78) to calculate the deposition fraction of sub-micron particles as the sum of a convective and a diffusive term. Furthermore, they analyzed two other alternatives to specify the convective flux at the wall and they concluded that a velocity correction based on a sub-grid Lagrangian solution improved numerical predictions for the local and regional deposition fractions of fine respiratory aerosols. However, the theoretical basis of their corrections is not fully justified. On the contrary, it seems like they were trying to find a way to better agree with the experimental findings. Moreover, we do not expect that this correction would modify significantly our deposition-fraction results because we simulate high inertia-particles (high Stokes-number particles), whose velocity responds slowly to changes of the fluid velocity. Their velocity at the center of the computational grid closest to the wall persists for a longer time than the velocity of fine aerosol particles ($d_p \leq 1\mu\text{m}$). More importantly, in the majority of our simulations, a body force independent of the fluid velocity, acts on these particles.

The modified convection-diffusion equation, Eq.(2.63) or (2.73), was obtained from the leading order correction of the particle velocity in terms of the particle relaxation time (in a low Stokes-number expansion). It arises from a perturbative solution of the particle-phase momentum conservation equation. Consequently, it captures the leading order effect of particle inertia on the usual convective diffusion equation, and hence it becomes important when both inertial and diffusive particle transport occur simultaneously (for an analysis of the low Stokes-number expansion in a simple shear flow, and the decoupling of the two continuum conservation equations, see Drossinos and Reeks (2005)).

Nevertheless, the range of validity of the low Stokes-number expansion has not been specified. Ferry and Balachandar (2001) investigated it partly, in particular the uniqueness of the Eulerian particle velocity field as a function of τ_p , in the absence of diffusion and with elastic particle rebound at the walls. Whereas they derived an inequality specifying how small τ_p should be, they ascertained the accuracy of the expansion through a comparison of the particle velocity obtained by Lagrangian particle tracking and by the Eulerian method truncated at various orders (zeroth, first, and second) in turbulent channel flow. They found that for small τ_p (specifically, when the particle response time normalized by the fluid time scale is less than unity) the first-order approximation gave a significant improvement over the zeroth-order term, but the second-order correction did not lead to further improvements. In this work, where in addition a concentration boundary layer exists and particles diffuse, the validity of the approximation is fully ascertained by comparing our results to experimental data and previous simulations.

2.2.6 Dispersed Phase: Numerical Solution

Once the fluid velocity \vec{v} is numerically obtained using *CADBA* code, the convective particle velocity \vec{v}_c is calculated from Eq.(2.61) and, subsequently, the modified convection-diffusion equation is solved for particle concentration. A primary scope of the present study is to incorporate the solution of the particles PTE into the existing CFD code (*CADBA*), thus the methodology used for the numerical treatment of it is chosen to

be analogous to that used for the carrier fluid flow. Therefore, the particle convection-diffusion equation (Eq.(2.73)) is solved in three dimensions using a finite volume method with a collocated arrangement of variables that takes into account grid non-orthogonality and is suitable for multi-block grids. The discretization and numerical treatment of the particle equation are described next; first the expressions for a Cartesian grid are obtained, and then the correction for non-orthogonal grid are introduced.

The typical topology of a Cartesian computational grid for a collocated arrangement of variables and the control volume (CV) are shown in Figure 4. The centre of the CV is computational node P , whereas E, W, N, S, T and B are its neighbor nodes and define the respective CV faces e, w, n, s, t and b .

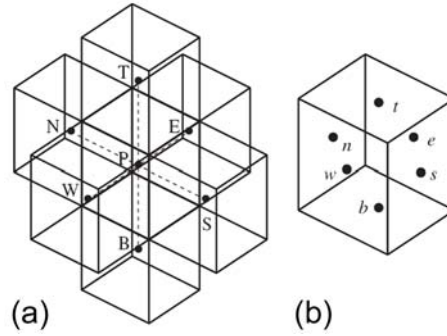


Figure 4: Topology of a Cartesian grid (a) and the control volume (b) (adapted from Neofytou and Tsangaris (2006)).

The net particle flux through the CV surface equals the sum of integrals over the six CV faces. Thus Eq.(2.65) becomes:

$$\sum_{\kappa} \left(\int_{S_{\kappa}} c \vec{v}_c \cdot d\vec{S} \right) = \sum_{\kappa} \left(Pe^{-1} \int_{S_{\kappa}} \nabla c \cdot d\vec{S} \right) , \quad (2.79)$$

or equivalently:

$$\sum_{\kappa} J_{\kappa} = 0 , \quad (2.80)$$

where J_{κ} is the total flux through the face κ , i.e. $J_{\kappa} = J_{\kappa}^c + J_{\kappa}^d$ with

$$J_{\kappa}^c = \int_{S_{\kappa}} c \vec{v}_c \cdot d\vec{S} , \quad (2.81)$$

the convective flux and

$$J_{\kappa}^d = -Pe^{-1} \int_{S_{\kappa}} \nabla c \cdot d\vec{S} , \quad (2.82)$$

the diffusive flux. As the particle velocity field and the properties are known, particle concentration c is the only unknown. The surface integrals of Eqs.(2.81) and (2.82) cannot be calculated exactly as only the values of c at the CVs centers are known, thus they have to be approximated.

In the following analysis, only CV face e is considered (Fig.5) . The expressions for the rest CV faces are derived in the same manner.

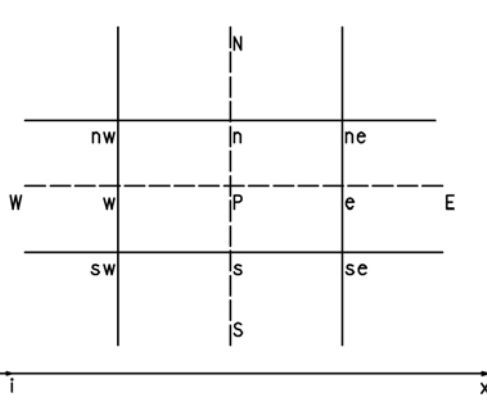


Figure 5: Typical Cartesian control volume and the notation used. For simplicity and clarity a two dimensional CV is shown (adapted from [Ferziger and Perić \(2002\)](#)).

Convective Term

The convective mass flow \dot{m}_e^c through CV face e is equal to:

$$\dot{m}_e^c = \int_{S_e} \vec{v}_c \cdot d\vec{S} \approx v_{c_x}|_e S_{e_x} \quad , \quad (2.83)$$

where v_{c_x} and S_{e_x} are the x-components of the convective velocity \vec{v}_c and the east face surface vector \vec{S}_e . The convective flux (Eq.(2.81)) can be, then, approximated by the product of the convective mass flow times the value c_e of particle concentration on the center of the face, e , that is:

$$J_e^c = \int_{S_e} c \vec{v}_c \cdot d\vec{S} \approx \dot{m}_e^c c_e \quad . \quad (2.84)$$

The convective-velocity term is treated by a deferred-correction approach to avoid application of high-order schemes that would result in big computational molecules ([Ferziger and Perić, 2002](#)). Thus, the convective term is split into an implicit part, $J_{\kappa,imp}^c$, which is discretized using a first order upwind scheme (UDS), and an explicit part, $J_{\kappa,exp}^c$, comprised of the difference between the UDS and the second-order central difference scheme (CDS). In particular, J_{κ}^c is written as:

$$J_e^c = J_{e,imp}^c + J_{e,exp}^c \quad , \quad (2.85)$$

where the implicit term is equal to:

$$J_{e,imp}^c = (\dot{m}_e^c c_e)^{UDS} \quad , \quad (2.86)$$

and the explicit is written as:

$$J_{e,exp}^c = \left[(\dot{m}_e^c c_e)^{CDS} - (\dot{m}_e^c c_e)^{UDS} \right]^{old} \quad . \quad (2.87)$$

The explicit part of the convective flux, Eq.(2.87), is evaluated using the values of the previous iteration. For the CDS, the value of c at the CV face center e is approximated by linear interpolation between the nodes P and E:

$$c_e = \lambda_e c_E + (1 - \lambda_e) c_P \quad , \quad (2.88)$$

where the interpolation factor λ_e is the ratio of the distance of e from the node P to the distance of node E from node P, that is:

$$\lambda_e = \frac{L_{Pe}}{L_{PE}} \quad . \quad (2.89)$$

On the other hand, the UDS is given by:

$$(\dot{m}_e^c c_e)^{\text{UDS}} = \max(\dot{m}_e^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_e^c, 0) c_E \quad , \quad (2.90)$$

i.e. the value of c at the CV face center e equals the one at node P, if $\dot{m}_e^c > 0$ (mass flow from P to E), or the value at node E, if $\dot{m}_e^c < 0$ (mass flow from E to P).

Substitution of the last equations into Eq.(2.85), gives the approximation of the convective flux at the center of the CV face e :

$$J_e^c = \max(\dot{m}_e^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_e^c, 0) c_E + \{[\lambda_e c_E + (1 - \lambda_e) c_P] - [\max(\dot{m}_e^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_e^c, 0) c_E]\}^{\text{old}} \quad . \quad (2.91)$$

If there is no mass flow between these two nodes ($\dot{m}_e^c = 0$), both the implicit and explicit parts of the convective flux are equal to zero, as expected.

Once the iterations converge, the low-order scheme (UDS) cancel out and the obtained solution corresponds to the higher-order scheme (CDS).

Diffusive Term

The diffusive flux of particle through CV face e (Eq.(2.82)) equals:

$$J_e^d = -\text{Pe}^{-1} \int_{S_e} \nabla c \cdot \hat{n} \, dS = -\text{Pe}^{-1} \int_{S_e} \frac{\partial c}{\partial n} \, dS \approx -\text{Pe}^{-1} \left. \frac{\partial c}{\partial n} \right|_e S_e \quad , \quad (2.92)$$

where \hat{n} the surface unit vector and S_e the surface of CV face e ($\vec{S}_e = \hat{n} S_e$). The term $\left. \frac{\partial c}{\partial n} \right|_e$ is the gradient of particle concentration in the direction of the surface vector. The second-order central difference approximation is used for the concentration gradient, so Eq.(2.92) becomes:

$$J_e^d = -\text{Pe}^{-1} S_e \frac{c_E - c_P}{L_{PE}} \quad . \quad (2.93)$$

Corrections for Non-Orthogonal Grids

The discretization of the convective and diffusive fluxes in the preceding analysis, is valid when a Cartesian (orthogonal) grid is used for the description of the computational domain. A non-orthogonal computational grid, however, differs from a Cartesian one. In the latter case, the surface vector has components in more than one Cartesian directions

and all the components of the convective velocity contribute to the mass flux (Fig.(6)). Therefore, Eq.(2.83) becomes:

$$m_e^c = v_{c_x}|_e S_{e_x} + v_{c_y}|_e S_{e_y} + v_{c_z}|_e S_{e_z} \quad , \quad (2.94)$$

i.e. each velocity component is multiplied by the corresponding surface vector component.

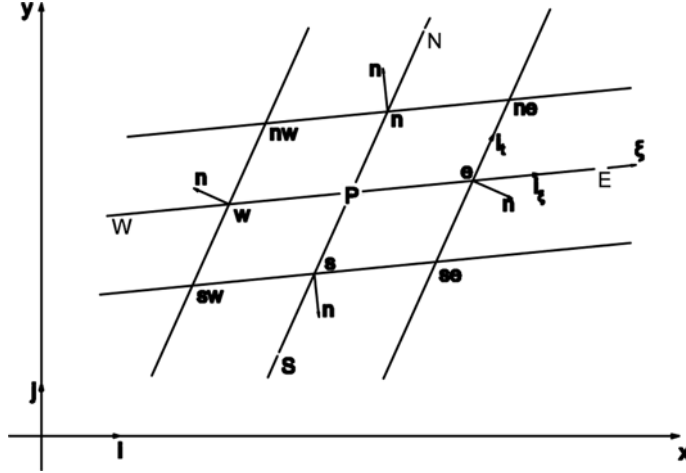


Figure 6: Typical non-orthogonal computational volume and the notation used. For simplicity and clarity a two dimensional CV is shown (adapted from Ferziger and Perić (2002)).

An important difference between a Cartesian and a non-orthogonal grid is, also, that the line that connects two neighbor computational nodes, i.e. P and E, cuts the CV face at the point e' , which may be different from the face center e (Fig.(7)). Due to this fact, the previously derived approximations of the concentration and its gradient are second-order accurate at e' .

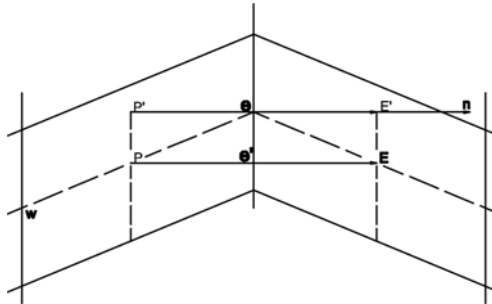


Figure 7: Topology in the case of arbitrary CV shape (adapted from Ferziger and Perić (2002)).

In order to preserve the second-order accuracy of the midpoint rule on irregular grids, concentration and its gradient should be calculated at the center e of the CV face with second-order approximations. Therefore, Eqs.(2.91) and (2.93) should be properly corrected to account for the general case of a non-orthogonal grid.

The simplest second-order accurate scheme that relates the value of particle concentration at the CV face centre e to that of the point e' is (Ferziger and Perić, 2002):

$$c_e = c_{e'} + \nabla c|_e \cdot (\vec{r}_e - \vec{r}_{e'}) \quad , \quad (2.95)$$

which uses the concentration gradient at the CV center and is suitable for CVs of arbitrary shape. It should be noted that no correction is used for the gradient of c from e' to e ,

i.e. it is assumed that $\partial c/\partial \xi|_e \approx \partial c/\partial \xi|_{e'}$, because the need for the second gradient of c would lead to higher computational cost.

Based on Eq.(2.95), the CDS scheme used in the discretization of the explicit convective flux (Eq.(2.88)), is now corrected to:

$$c_e = \lambda_e c_E + (1 - \lambda_e) c_P + \nabla c|_e \cdot (\vec{r}_e - \vec{r}_{e'}) \quad , \quad (2.96)$$

which is incorporated in Eq.(2.91) and the discretization of the convective flux becomes:

$$\begin{aligned} J_e^c = & \max(\dot{m}_{e'}^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_{e'}^c, 0) c_E \\ & + \{[\lambda_e c_E + (1 - \lambda_e) c_P + \nabla c|_e \cdot (\vec{r}_e - \vec{r}_{e'})]\} \\ & - [\max(\dot{m}_{e'}^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_{e'}^c, 0) c_E]^{old} \end{aligned} \quad . \quad (2.97)$$

The correction of the diffusive flux is implemented through a deferred correction approach. The implicit term are based on the values at nodes P and E without considering the grid irregularity, i.e. the values at e' are used, while the different between the implicit term and the more accurate approximation is treated explicitly. Therefore, the diffusive flux (Eq.(2.82)) for irregular grids is written:

$$J_e^d = J_{e,imp}^d + J_{e,exp}^d \quad , \quad (2.98)$$

where the implicit part equals:

$$J_{e,imp}^d = -Pe^{-1} \left. \frac{\partial c}{\partial \xi} \right|_e S_e \quad , \quad (2.99)$$

or equivalently:

$$J_{e,imp}^d = -Pe^{-1} S_e \frac{c_E - c_P}{L_{PE}} \quad , \quad (2.100)$$

with ξ is denoted the direction of the line PE (see also Fig.(6), and the explicit part is equal to:

$$J_{e,exp}^d = -Pe^{-1} S_e \left[\left. \frac{\partial c}{\partial n} \right|_e - \left. \frac{\partial c}{\partial \xi} \right|_e \right]^{old} \quad . \quad (2.101)$$

The explicit part of the diffusive flux is, thus, the difference of the particle concentration gradient in the directions of the surface vector (first term in the brackets) and the line PE (second term in the brackets) calculated with values of the previous iteration.

The gradient of the concentration in the direction of the surface vector is given by:

$$\left(\left. \frac{\partial c}{\partial n} \right|_e \right)^{old} = (\nabla c|_e)^{old} \cdot \hat{n} \quad , \quad (2.102)$$

whereas the one in the direction of the PE line by:

$$\left(\left. \frac{\partial c}{\partial \xi} \right|_e \right)^{old} = (\nabla c|_e)^{old} \cdot \hat{\xi} \quad , \quad (2.103)$$

where $\hat{\mathbf{i}}_\xi$ is the unit vector in the direction of the line PE. Consequently, the explicit part of the diffusive flux equals:

$$J_{e,exp}^d = -Pe^{-1} S_e (\nabla c|_e)^{old} \cdot (\hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{i}}_\xi) \quad , \quad (2.104)$$

and the discretization of the diffusive flux for irregular grids becomes:

$$J_e^d = -Pe^{-1} S_e \frac{c_E - c_P}{L_{PE}} - Pe^{-1} S_e (\nabla c|_e)^{old} \cdot (\hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{i}}_\xi) \quad . \quad (2.105)$$

2.2.6.1 Algebraic Equation

Substitution of Eqs.(2.97) and (2.105) in Eq.(2.80) gives:

$$\begin{aligned} \sum_{\kappa} \left[J_{\kappa,imp}^c + J_{\kappa,imp}^d + (J_{\kappa,exp}^c + J_{\kappa,exp}^d) \right] &= 0 \Rightarrow \\ \sum_{\kappa} \left(J_{\kappa,imp}^c + J_{\kappa,imp}^d \right) &= \sum_{\kappa} \left(J_{\kappa,exp}^c + J_{\kappa,exp}^d \right) \quad . \end{aligned} \quad (2.106)$$

Using Eqs.(2.86) and (2.100) for the implicit fluxes in the LHS of the last equality we obtain:

$$\begin{aligned} \sum_{\kappa} \left[\max(\dot{m}_{\kappa}^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_{\kappa}^c, 0) c_K - Pe^{-1} S_{\kappa} \frac{c_K - c_P}{L_{PK}} \right] &= \\ \left\{ \sum_{\kappa} \left[\max(\dot{m}_{\kappa}^c, 0) + \frac{S_{\kappa}}{PeL_{PK}} \right] \right\} c_P + \sum_{\kappa} \left\{ \left[\min(\dot{m}_{\kappa}^c, 0) - \frac{S_{\kappa}}{PeL_{PK}} \right] c_K \right\} \quad . \end{aligned} \quad (2.107)$$

Therefore, the discretized form of Eq.(2.73) applied on a computational cell leads to the following algebraic equation:

$$\alpha_P c_P + \sum_{\kappa} \alpha_{\kappa} c_{\kappa} = q \quad , \quad L = T, B, E, W, N, S \quad , \quad (2.108)$$

where the subscript P denotes the computational cell. In Eq.(2.108) α_{κ} are the coefficients of the unknown concentrations, from which the coefficient of P equals:

$$\alpha_P = \sum_{\kappa} \left[\max(\dot{m}_{\kappa}^c, 0) + \frac{S_{\kappa}}{PeL_{PK}} \right] \quad , \quad (2.109)$$

whereas the coefficients α_{κ} are given by:

$$\alpha_{\kappa} = \min(\dot{m}_{\kappa}^c, 0) - \frac{S_{\kappa}}{PeL_{PK}} \quad . \quad (2.110)$$

If $\sum_{\kappa} (\dot{m}_{\kappa}^c)$ is added and subtracted from Eq.(2.109), after some manipulation we get:

$$\begin{aligned} \alpha_P &= \sum_{\kappa} \left\{ [\max(\dot{m}_{\kappa}^c, 0) - \dot{m}_{\kappa}^c] + \frac{S_{\kappa}}{PeL_{PK}} + \dot{m}_{\kappa}^c \right\} \\ &= \sum_{\kappa} \left[-\min(\dot{m}_{\kappa}^c, 0) + \frac{S_{\kappa}}{PeL_{PK}} + \dot{m}_{\kappa}^c \right] \quad , \end{aligned} \quad (2.111)$$

or equivalently:

$$\alpha_P = - \sum_{\kappa} (\alpha_{\kappa} - \dot{m}_{\kappa}^c) \quad , \quad (2.112)$$

because for a number χ it holds that $\max(\chi, 0) - \chi = -\min(\chi, 0)$. Equation (2.112) shows that only the coefficients of the neighbor to P nodes should be calculated, i.e. the coefficients at E, W, N, S, T and B. Finally, in Eq.(2.108) q is the source term containing all the known terms arising from the discretization, which in this case are the explicit parts of the discretized fluxes. That is:

$$q = \sum_{\kappa} (J_{\kappa,exp}^c + J_{\kappa,exp}^d) \quad . \quad (2.113)$$

Application of Eq.(2.108) on each cell results in a system of linear algebraic equations that is solved using the iterative strongly implicit procedure (SIP) (Ferziger and Perić, 2002), an incomplete lower-upper decomposition method.

2.3 CONCLUSIONS

In Chapter 2, the theoretical background and the numerical approach, on which the proposed methodology is based, are presented.

The derivation of the Navier-Stokes equations that govern the flow of an incompressible, Newtonian flow is described briefly. These equations describe fully the fluid velocity and pressure fields and are solved using the in-house CFD code developed by Neofytou and Tsangaris Neofytou and Tsangaris (2006). The code uses a finite-volume methodology with a collocated arrangement of variables, while it enables multi-block computations. A pressure-correction equation is used and the coupling of velocity and pressure is dealt with using the SIMPLE algorithm. In this code, the convection terms are discretized using the QUICK difference scheme, which is of third-order, whereas the central difference scheme (CDS) is used for the diffusion (viscous) terms. Herein, a solution is reached assuming steady-state, laminar flow of a Newtonian fluid of constant properties. The influence of the dispersed (particulate) phase on the fluid flow field is considered negligible (one-way coupling).

Regarding the dispersed phase, after a brief introduction to multiphase flows and the processes present in fluid-particle systems, a detailed description of the derivation of the equation that governs the transport of particles (PTE), is given. Internal aerosol processes are not taken into account in this study and it is assumed that the particulate phase can be considered as an ideal gas, i.e. that particles are dilute enough so that they do not interact with each other. Moreover, the low particle relation time expansion of the particle average momentum equation in case of isothermal, steady-state flow proposed by Fernandez de la Mora and Rosner (1982) is adopted in order to address inertial effects on Brownian diffusion. It is shown that the particle velocity is described by two components; *a*) a diffusive part, dependent only on the particle concentration gradient, and *b*) a convective part that depends only on the fluid velocity and its spatial gradients and incorporates the effects of particle inertia and external force fields . Incorporation of this particle velocity into the mass conservation equation of the particulate phase, gives a population balance equation for the particles that incorporates particle convection, diffusion, inertia and the influence of external force fields in an Eulerian formulation.

The methodology used for the numerical treatment of the particulate phase transport is similar to the one used for the fluid flow, as the direct connection of the two codes is desired. Therefore, the particles population balance equation is solved in three dimensions using a finite volume method with a collocated arrangement of variables that takes into

account grid non-orthogonality and is suitable for multi-block grids. In the code, the convective term is discretized using a second-order deferred correction approach, while a second-order central difference scheme is preferred for the diffusive term.

VALIDATION

Prior to applying the fully Eulerian approach in order to investigate particle transport and deposition in practical applications, the accuracy of the computational methodology should be validated. Therefore, the results of the Eulerian model are compared to findings of various experimental, analytical and computational studies available in literature.

3.1 VALIDATION OF THE DIFFUSIVE TERM

The numerical discretization of the diffusive term is validated by solving the usual convective diffusion problem for a passive tracer, that is for an inertialess particle. Given the similarities of heat and mass transfer, the Graetz-Nusselt problem is an appropriate comparison basis. This problem considers the development of the temperature profile for an incompressible fluid of constant properties, while it flows in a straight, circular duct, of diameter d_t , having fully developed laminar velocity profile, of mean velocity v_o (Shah and London, 1978). The solution is reached with the following boundary conditions; uniform temperature profile, T_{in} , at the inlet and constant, uniform temperature at the tube wall, $T_w \neq T_{in}$. The following equation, in dimensionless integral form, and boundary conditions describe the Graetz-Nusselt problem:

$$\int_S T \vec{v} \cdot d\vec{S} = 2Pe_{th}^{-1} \int_S \nabla T \cdot d\vec{S}$$

$$T = T_{in} = \text{constant} \quad \text{at the inlet (z=0)} \quad ,$$

$$T = T_w = \text{constant} \quad \text{at the wall}$$
(3.1)

where $Pe_{th} = d_t v_o / \alpha$ is the thermal Peclet number and α the fluid thermal diffusivity.

The analytical solution of Eq.(3.1), derived independently by Graetz (1883, 1885) and Nusselt (1910), gives the fluid temperature distribution in an infinite series form:

$$T^* = \frac{T - T_w}{T_{in} - T_w} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n R_n \exp(-2\lambda_n^2 z^*) \quad ,$$
(3.2)

where $z^* = z / Pe_{th}$ is the dimensionless axial coordinate. In Eq.(3.2), λ_n , R_n and C_n are eigenvalues, eigenfunctions and constants, respectively, the values of which are given in Shah and London (1978).

In Fig.8, the mean (mixing) fluid temperature T_m , which is defined by:

$$T_m = \frac{\int_{S_t} T \vec{v} \cdot d\vec{S}_t}{\int_{S_t} \vec{v} \cdot d\vec{S}_t} \quad ,$$
(3.3)

is shown for different thermal Peclet numbers. In Eq.(3.3) S_t is the flow area. The agreement of our numerical simulations with both the analytical results of Shah and

London (1978) and the standard numerical results of Schmidt and Zeldin (1971) for $Pe_{th} \gg 1$ is excellent.

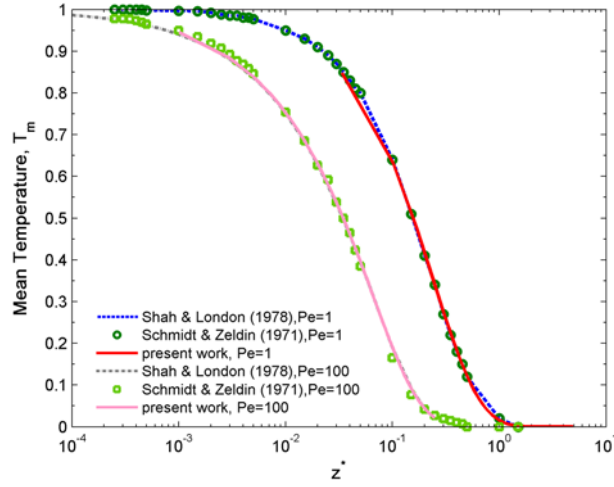


Figure 8: Mixing temperature in a straight duct of circular cross-section for different thermal Peclet numbers.

Overall, this comparison demonstrates that our numerical treatment of the diffusive term is valid.

3.2 VALIDATION OF THE EXTERNAL FORCE TERM

The validity of the external force term in the particle transport equation (Eq(2.73)) will be investigated through the effect of gravity on particle transport, which is a significant deposition mechanism of large aerosol particles, i.e. for $d_p > 1 \mu\text{m}$, in the upper respiratory system. Herein, the transport of aerosol particles in an inclined circular tube under the sole influence of gravity for a fully developed laminar (Poiseuille) fluid flow is considered (Fig.9), for which analytical solutions are available. The fraction of the deposited particles in the duct, η , is numerically calculated by:

$$\eta = 1 - \frac{\dot{c}|_{\text{outlet}}}{\dot{c}|_{\text{inlet}}} \quad , \quad (3.4)$$

where $\dot{c} = \int_{S_t} c \vec{v}_p \cdot d\vec{S}_t$ is the dimensionless particle flowrate through the area S_t of the tube cross-section. The subscripts “inlet” and “outlet” refer to the tube inlet and outlet respectively.

In this case, the particle convective velocity (Eq.(2.61)) is written as:

$$\vec{v}_p = \vec{v} + \vec{v}_s \quad , \quad (3.5)$$

with \vec{v}_s the particle settling velocity given by Eq.(2.35). Equation (3.5) is incorporated into the integral form of the PTE (Eq.(2.66)) giving:

$$\int_S c (\vec{v} + \tau_p \vec{g}) \cdot d\vec{S} = D \int_S \nabla c \cdot d\vec{S} \quad , \quad (3.6)$$

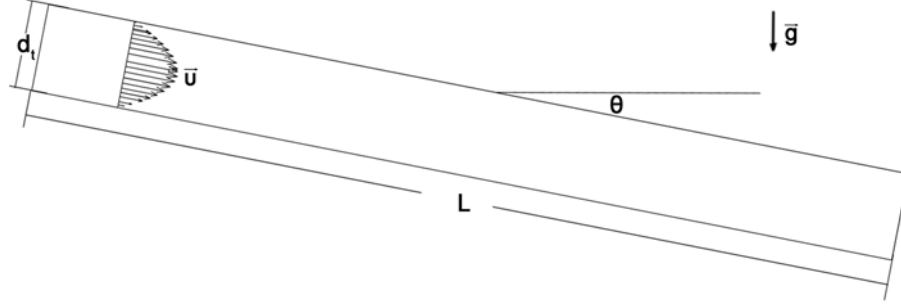


Figure 9: Aerosol particle sedimentation in a tube of circular cross-section of diameter d_t and length L , which is at angle θ from the horizontal. Poiseuille fluid flow, with mean velocity v_m is considered (adapted from Finlay (2001)).

or in dimensionless form (the same notation is kept for simplicity):

$$\int_{\mathcal{S}} c (\vec{v} + \text{StFr}^{-1} \hat{g}) \cdot d\vec{S} = \text{Pe}^{-1} \int_{\mathcal{S}} \nabla c \cdot d\vec{S} \quad , \quad (3.7)$$

where $\text{Fr} = v_o^2/d_t g$ is the dimensionless Froude number, which provides an estimation of the importance of particle convection to gravitational settling. In Eq.(3.7), $\hat{g} = \vec{g}/g$, where $g = 9.81\text{m/s}^2$, is the unit vector in the direction of the acceleration of gravity.

The results of the Eulerian model are compared to those of Finlay (2001), who presented an analytical solution for the gravitational settling of particles in each generation of the human lung. In particular, if $v_o = v_s/v_m$ and $\ell_o = L/d_t$, according to the analysis of Finlay (2001), for Poiseuille fluid flow, the particle deposition fraction in the circular tube is equal to:

$$P_s = 1 - E - \Omega \quad , \quad (3.8)$$

where E is the fraction of particles escaping the tube, given by:

$$E = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \left[\sqrt{\gamma(1-\gamma)} (1-2\gamma) + \arcsin(\sqrt{1-\gamma}) \right] & \text{for } -90^\circ \leq \theta \leq 0^\circ \\ \frac{2}{\pi} \arcsin(\sqrt{1-\eta^2}) - \frac{\sqrt{1-\eta^2}}{\pi(1+v_o \sin\theta)} [3v_o \ell_o \cos\theta - (2+v_o \sin\theta)\eta] & \text{for } 0^\circ < \theta \leq 90^\circ \end{cases} \quad , \quad (3.9)$$

and Ω is the fraction of particles retreating out of the tube due to gravity, which is equal to:

$$\Omega = \begin{cases} 1 - \frac{1}{\pi} \left[3\sqrt{s(1-s)} + \arcsin\sqrt{1-s} + (1-9s^2) \arcsin\sqrt{\frac{1-s}{1+3s}} \right] & \text{for } -90^\circ \leq \theta \leq 0^\circ \\ 0 & \text{for } 0^\circ < \theta \leq 90^\circ \end{cases} \quad . \quad (3.10)$$

In the previous relationships (Eqs.(3.9) and (3.10)), θ is the angle of the circular tube from the horizontal as shown in Fig.9. Moreover, the parameters γ , η and s are given by:

$$\gamma = \frac{\left(\frac{3}{4}v_o \ell_o \cos\theta\right)^{2/3}}{1 - \frac{1}{2}v_o \sin\theta} \quad , \quad (3.11)$$

$$\eta = \frac{\left[\frac{v_o \left(6\ell_o \cos\theta + \sqrt{4v_o \sin^3\theta + 36\ell_o^2 \cos^2\theta} \right)}{16} \right]^{1/3}}{\frac{v_o^{2/3} \sin\theta}{2^{2/3} \left(6\ell_o \cos\theta + \sqrt{4v_o \sin^3\theta + 36\ell_o^2 \cos^2\theta} \right)^{1/3}}}, \quad (3.12)$$

and

$$s = \frac{\frac{1}{6}v_o \sin\theta}{1 - \frac{1}{2}v_o \sin\theta}. \quad (3.13)$$

For the case of the trachea (tube diameter $d_t = 0.018\text{m}$, length $L = 0.125\text{m}$ and mean inlet velocity $v_m = 1.166\text{m/s}$), the results of the Eulerian model are identical to the analytical solution, as shown in Fig.10. The parameter k in the figure, is defined by (Finlay, 2001):

$$k = \frac{3}{4} \text{St} \frac{gL}{v_o^2}. \quad (3.14)$$

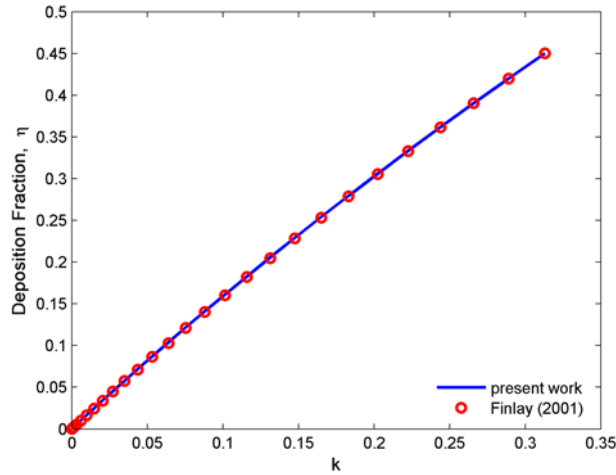


Figure 10: Deposition fraction of particles sedimenting in a straight duct of circular cross-section.

The inclusion of the gravitational effects in the particle transport equation through the settling velocity gives accurate results, as shown in the previous analysis.

3.3 VALIDATION OF THE INERTIAL TERM

In the proposed Eulerian description of the dispersed phase, particle velocity is approximated in the mass conservation equation of particles, or equivalently in PTE, by an expression obtained in the limit of low particle relaxation time (cf. section 2.2.4). The main goal of the present work is to study the validity of the particle velocity approximation for higher particle relaxation times (or equivalently higher Stokes numbers), where inertial effects are important and gravitational settling may not be a priori neglected. Taking

into account simultaneously particle inertial effects and gravitational settling, the particle velocity (Eq.(2.60)) becomes:

$$\vec{v}_p = \vec{v} + \vec{v}_s - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} - D \nabla \ln c + O(\tau_p^2) \quad . \quad (3.15)$$

If Eq.(3.15) is incorporated into the integral dimensionless form of the PTE (Eq.(2.73)), then we obtain:

$$\int_S c [\vec{v} + St (Fr^{-1} \hat{g} - 0.5 \vec{v} \cdot \nabla \vec{v})] \cdot d\vec{S} = 0.5 Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\vec{S} \quad . \quad (3.16)$$

Equation (3.16) is solved numerically, in order calculate the concentration field for transport of coarse aerosol particles ($5\mu\text{m} \leq d_p \leq 20\mu\text{m}$) in a simple bend geometry of curvature ratio R_o assuming laminar flow field. The results of the fully Eulerian model are compared with benchmark solutions available in literature. It should be noted that the '0.5' coefficients in front of the inertial and diffusive terms is a result of the Stokes and Peclet numbers definitions based on tube radius, $r_t = d_t/2$, instead of its diameter to conform with the studies found in literature.

3.3.1 Bend Geometry and Computational Grid

Deposition of a monodispersed aerosol population in a 90° bend of circular cross-section was simulated adopting the geometry proposed by Pui et al. (1987) and Breuer et al. (2006). The main geometrical features of the bend are shown in Fig.11. Two linear sections, the first of length d_t before the bend inlet and the second of length $2d_t$ after the bend exit, are introduced to ensure that the fluid flow in the bend is not disturbed by the inlet and outlet conditions. The diameter of a cross-section of the tube at the symmetry plane ($z=0.5$) is denoted as A-A, whereas the diameter of a cross-section of the tube perpendicular to the symmetry plane is denoted as B-B. Given this geometry, the flow Reynolds number is $Re = \rho_f v_o d_t / \mu_f$. Note that the bend radius R_b depends on the scale used to render lengths dimensionless, whereas the bend curvature ratio $R_o (= R_b / r_t)$ does not.

Based on the description of the experimental set up of Pui et al. (1987), the orientation in 3D space of the tubes for $Re = 100$ is that of Fig.12(a) and for $Re = 1000$ is that of Fig.12(b). The unit gravity vectors in each case are also noted in this figure. For the case $Re = 100$ a vertical inlet section was used in the experimental set up of Pui et al. (1987) to minimize particle settling in this section, whereas a horizontal inlet-vertical outlet was used for the high Reynolds number experiments ($Re = 1000$).

The computations were performed using a grid based on an O-type multiblock structure to avoid singularities imposed by a polar grid. The outer block is nearly polar, enclosing the square inner block as shown in Fig.13. The grid is refined in the vicinity of the wall to capture in detail the concentration boundary layer, a region important for the calculation of particle deposition.

The resolution of the grid is about 1.46×10^6 computational volumes (CVs), consisting of about 6500 grid points in every cross section and 225 grid points in the direction of the flow.

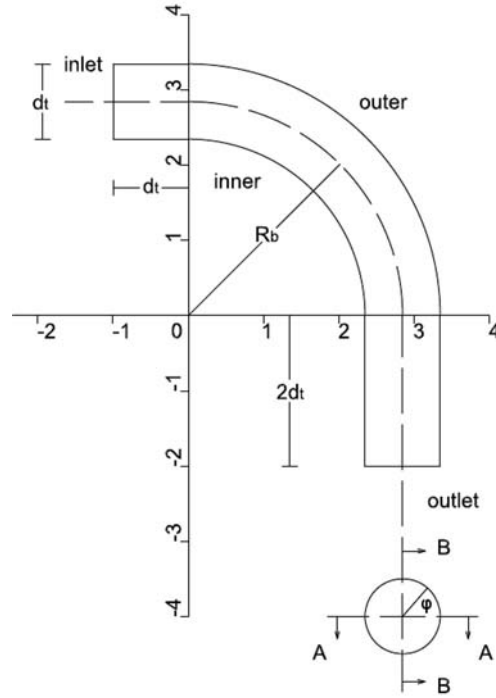


Figure 11: Bend geometry ($R_b = 2.85$, $R_o = 5.7$); A-A is the diameter of the cross-section at the symmetry plane and B-B the diameter perpendicular to it.

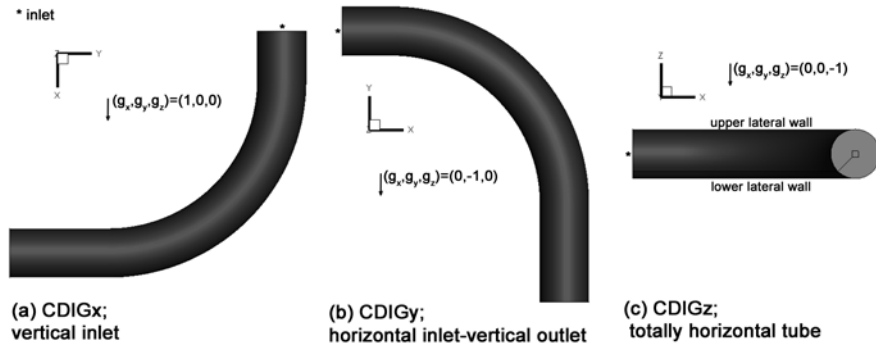


Figure 12: Orientation of the bends with respect to the acceleration of gravity; (a) vertical inlet (CDIGx), (b) horizontal inlet - vertical outlet (CDIGy) and (c) totally horizontal tube (CDIGz).

3.3.2 Continuous Phase

In bends of circular cross-sections with curvature ratios $R_o > 5$, the fluid flow field depends exclusively on a dimensionless number, called Dean number (Pui et al., 1987). This number is defined as:

$$De = \frac{Re}{\sqrt{R_o}} \quad , \quad (3.17)$$

and is a measure of the importance of the fluid centrifugal and inertial forces to the viscous forces.

The validity of the calculated flow field is ascertained by simulating two flows with $De = 38$ ($Re = 100$, $R_o = 7$) and $De = 423$ ($Re = 1000$, $R_o = 5.6$). Results are shown in Fig.14. The axial velocity profiles along the diameters A-A in the symmetry plane (left

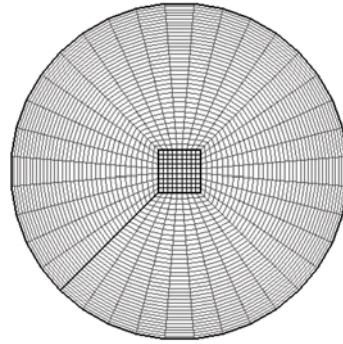


Figure 13: Grid cross-section

column) are skewed towards the outer bend wall due to the centrifugal forces exerted on the fluid. The axial velocity profiles along the diameters B-B which are perpendicular to the symmetry plane (right column) are deformed but remain symmetric with respect to the symmetry plane of the bend. The deformation of the axial velocity profiles along the diameters A-A shifts towards the outer boundary wall of the bend with increasing Dean number. These results are in good agreement with the numerical solution of [Tsai and Pui \(1990\)](#).

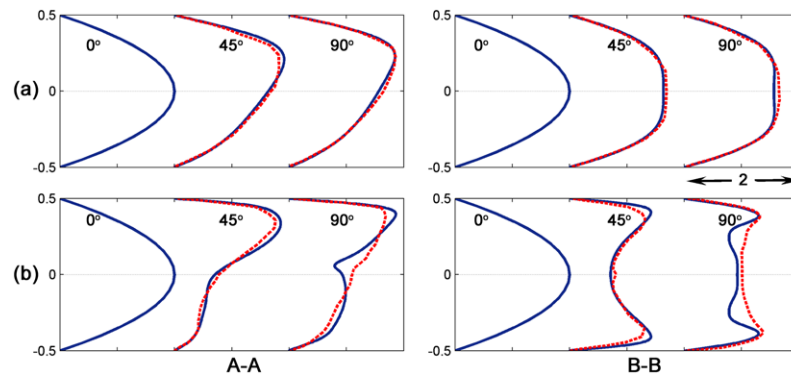


Figure 14: Axial velocity profiles at $\theta = 0^\circ$ (inlet), $\theta = 45^\circ$ and $\theta = 90^\circ$ (exit) cross sections along the diameters A-A (left) and B-B (right). (a) $De = 38$; (b) $De = 423$. Results of this study are shown with a continuous line, results of [Tsai and Pui \(1990\)](#) are shown with a dashed line.

The secondary-flow streamlines and contours of constant axial fluid velocity are shown in [Fig. 15](#) at angles $\theta = 45^\circ$ and $\theta = 90^\circ$ along the bend for Dean numbers $De = 38$ (left column) and $De = 423$ (right column). The streamlines of the low Dean number secondary flow show the formation of a pair of symmetric, counter-rotating vortices, the centers of which are slightly displaced towards the outer bend wall at both angles. The main feature of the flow is the formation of an inviscid rotational core surrounded by a thin boundary layer. The peak of the axial fluid velocity is located closer to the outer wall. Our results are similar to those obtained by [Pui et al. \(1987\)](#) for intermediate Dean numbers ($17 \leq De \leq 370$).

The secondary-flow streamlines for $De = 423$ at 45° also show two main, symmetric counter-rotating vortices, but their centers are displaced towards the inner bend wall and they are skewed with respect to the symmetry plane. In addition, increased centrifugal forces lead to increased fluid flow towards the outer wall; the boundary layer of the secondary flow gets thinner near the outer wall and thicker near the inner wall. At

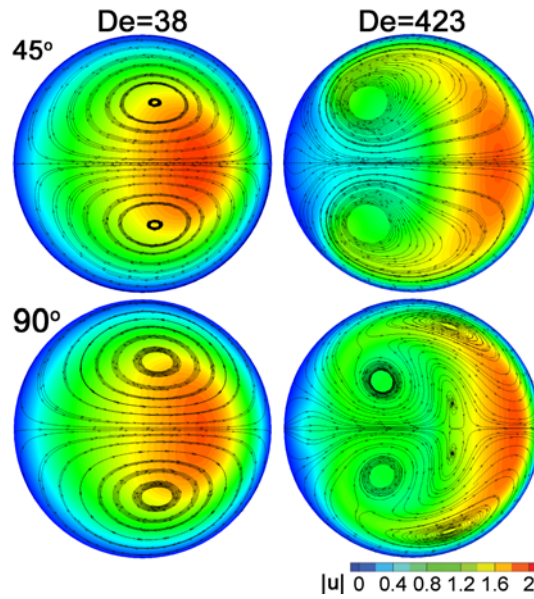


Figure 15: Secondary-flow streamlines and contours of constant axial velocity at $\theta = 45^\circ$ (top) and $\theta = 90^\circ$ (bottom) cross sections for $De = 38$ (left) and $De = 423$ (right).

$\theta = 90^\circ$ six vortices that are per two symmetric with respect to the diameter A-A are formed; the peak of the axial fluid velocity shifts further towards the outer wall. These results are in agreement with both the theoretical descriptions of Pui et al. (1987) for large Dean numbers ($De \geq 370$) and the numerical simulations of Breuer et al. (2006).

3.3.3 Dispersed Phase

Bend Deposition

Particle deposition fractions obtained using the fully Eulerian model are compared to those of previous theoretical calculations and experimental results. Simulations were performed for both analytically and experimentally obtained flow fields.

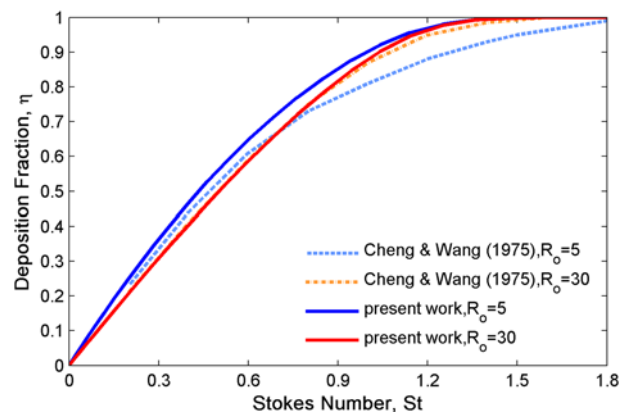


Figure 16: Deposition fraction – Comparison with analytical results of Cheng and Wang (1975).

Deposition calculations without gravitational settling were performed for two bend curvature ratios ($R_o = 5$ and 30) with the ideal flow field without secondary flow used by Cheng and Wang (1975); calculated deposition fractions are compared to their analytical

Fluid temperature T	293 K
Fluid density ρ_f	1.21 kg/m ³
Fluid dynamic viscosity μ_f	1.81×10^{-5} kg/m s
Particle density ρ_p	900 kg/m ³
Particle diameter d_p	5 – 20 μ m
<hr/>	
<i>Dean number</i> $De = 38$ ($Re = 100, R_o = 7, R_b = 3.5$)	
Tube diameter d_t	0.93×10^{-3} m
Fluid mean inlet velocity v_o	1.686 m/s
<hr/>	
<i>Dean number</i> $De = 419$ ($Re = 1000, R_o = 5.7, R_b = 2.85$)	
Tube diameter d_t	3.95×10^{-3} m
Fluid mean inlet velocity v_o	3.86 m/s

Table 1: Fluid and particle properties used in the 90° bend simulations.

results in Fig.16. The predictions of the Eulerian model agree with the analytical solution at low Stokes numbers, whereas they diverge at high Stokes numbers and at the low bend curvature ratio. The disagreement at high Stokes numbers is not unexpected since the model is based on a low Stokes-number expansion. The difference is at maximum 10%, tending to zero with increasing bend curvature, i.e. as particle inertial effects become weaker.

Simulations were also performed for experimental flows taking into account both gravitational and inertial effects and using the parameters shown in Table 1. Numerical simulations of aerosol flows for two Dean numbers ($De = 38, 419$) are compared to the experimental results of Pui et al. (1987), who used oleic acid aerosol particles of varying diameters from 5 μ m to 20 μ m, as well as with Lagrangian simulations.

The Eulerian model predicts well the deposition fraction with respect to experimental data of Pui et al. (1987) for both $De = 38$ and $De = 419$, as shown in Figs.17 and 18 respectively.

These experiments have been used repeatedly for the validation of deposition efficiency calculations via Lagrangian simulations of the particulate phase for the $De = 419$ case. The results of some of these simulations (Cheng and Wang, 1981; Breuer et al., 2006), are compared to ours in Fig.18, allowing a direct comparison of Eulerian and Lagrangian methods. The deposition fractions calculated with the Eulerian model differ from the results of Cheng and Wang (1981) (who performed Lagrangian simulations with the analytical fluid flow proposed by Mori and Nakayama (1965)) by less than 10%. However, the difference is up to 30% with the numerical results of Tsai and Pui (1990) and Breuer et al. (2006), who solved numerically for the flow field and used a different friction law. It should be noted that the aforementioned Lagrangian simulations do not take into account gravity. However, we found that gravity is not important compared to the inertial effects for $De = 419$.

Particle Concentration Profiles

One of the most appealing features of the Eulerian approach is that it allows an easy calculation of particle concentration profiles. The spatial distribution of particle concentration is presented in Fig.19 at the $\theta = 45^\circ$ and $\theta = 90^\circ$ cross sections along the bend for $De = 38$ and $St = 0.36$ (first column) and 1.18 (second column), and $De = 419$ and

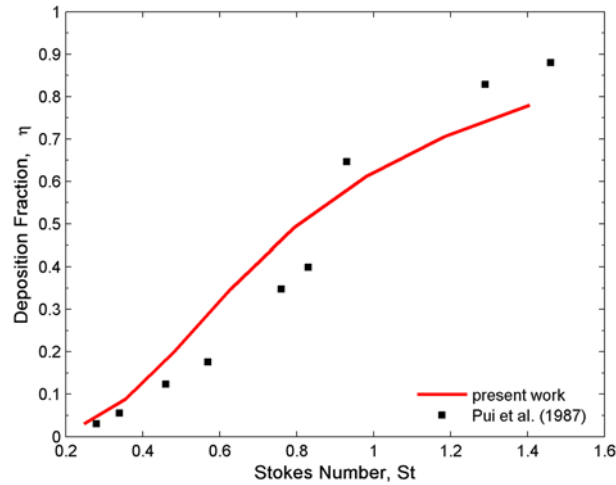


Figure 17: Deposition fraction for $De = 38$ — Comparison with experimental measurements.

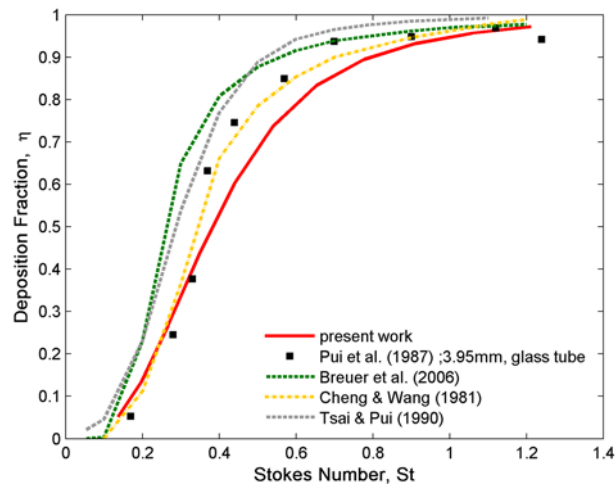


Figure 18: Deposition fraction for $De = 419$ — Comparison with experimental measurements and numerical simulations.

$St = 0.35$ (third column) and 1.21 (fourth column). The color scale was chosen to vary from 0 (light) to 15 (dark) to visualize the main features of the concentration profiles since maximum particle concentrations of approximately 570 ($De = 38$) to 1100 ($De = 419$) were calculated. For the low Dean-number flow, lower Stokes number particles ($St = 0.36$) follow the fluid streamlines and the main features of the secondary fluid flow can be recognized. Deposition is negligible, though there is significant particle accumulation close the bend walls. With increasing Stokes number, and consequently inertial effects, bend deposition increases, the secondary flow persists and particles accumulate closer to the walls. Nevertheless, particle trajectories do not deviate significantly from the gas streamlines. For the higher Stokes number ($St = 1.18$) the particle concentration field is qualitatively different from the fluid velocity field because inertial effects dominate; almost no particles exit the bend and the deposition fraction tends to unity. The large particle-free regions in Fig.19 make evident the difficulty to compute particle concentrations via traditional numerical implementations of Lagrangian particle tracking: a very dense particle-injection grid would be required to capture the small regions where the particle concentration is low. As mentioned in the Introduction (Chapter 1), for highly

inhomogeneous spatial particle distributions an improved numerical scheme, such as suggested by Garg et al. (2009), should be used in the Lagrangian simulations. These trends become more prominent for $De = 419$ since the fluid flow is more intense.

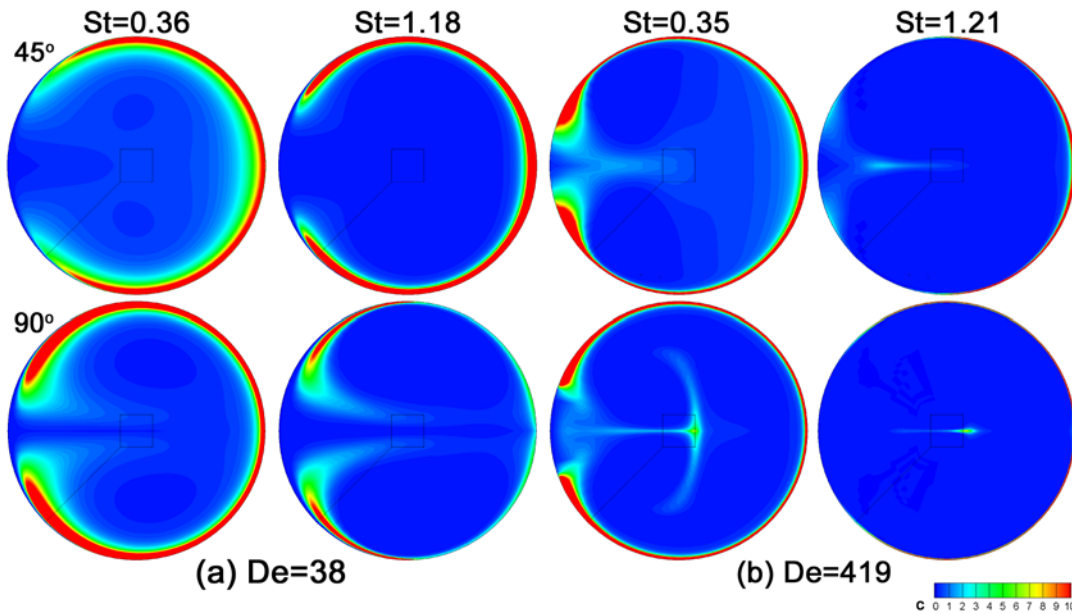


Figure 19: Particle concentration at $\theta = 45^\circ$ (top row) and $\theta = 90^\circ$ (bottom row) cross sections along the bend. (a) $De = 38$ (first two columns) and (b) $De = 419$ (last two columns).

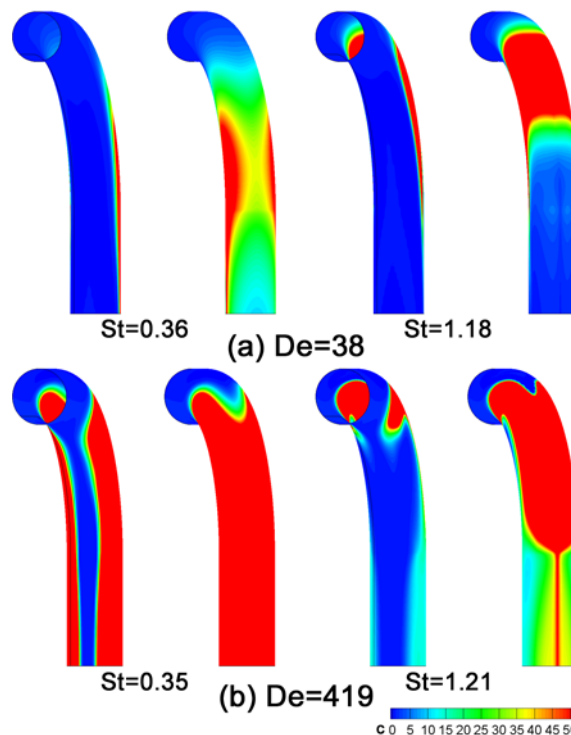


Figure 20: Particle concentration at the wall boundary. (a) Top: $De = 38$; (b) Bottom: $De = 419$.

CVs ($\times 10^3$)		ϵ_{RMS} (%)
coarse	fine	
276	698	4.53
698	1173	3.48
1173	1457	1.36
1457	1747	0.31

Table 2: A measure of grid convergence; the root mean square error of particle concentration ϵ_{RMS} for different grid densities (coarse and fine).

Deposition Sites

The location of particle deposition in terms of the particle concentration at the wall boundary is shown in Fig.20 for $De = 38$ (top) and 419 (bottom): the particle concentration at the computational wall-boundary cell is shown. Deposition sites are shown for low and high Stokes numbers, and the bend is presented from both the inner and outer sides. For both Dean numbers, for low Stokes numbers ($St = 0.36$ and $St = 0.35$) significant deposition occurs towards the exit of the bend, as well as at the last straight portion of the tube. As a result of the secondary flow a substantial amount of particles deposit on the bend side walls, in addition to those deposited on the outer wall. For high Stokes numbers ($St = 1.18$ and $St = 1.21$) deposition occurs closer to the bend inlet, and particles deposit mostly at the outer walls. Thus, the particle-free zone of the bend walls at the inner side is wider in this case. The aforementioned trends are particularly obvious for the higher Dean-number flow. These findings are in agreement with the experimental observations made by Pui et al. (1987). Moreover, comparison of the two sub-figures (a) and (b) confirms that the effect of particle inertia is considerably more intense at higher Dean numbers.

3.3.4 Grid Independence

Grid independence of the solution was tested using different grid densities. The root-mean-square of the relative error of the particle concentration for various grid densities is shown in Table 2. The root-mean-square is defined as:

$$\epsilon_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{\sum \epsilon_i^2}{N}} \quad , \quad (3.18)$$

where ϵ_i is the relative error given by:

$$\epsilon_i = \left| \frac{c_{i,\text{coarse}} - c_{i,\text{fine}}}{c_{i,\text{fine}}} \right| \quad , \quad (3.19)$$

and N the number of points used (here 300 from different regions of the computational domain). Table 2 shows that a further increase of the CVs of the chosen grid by 20% (from 1457×10^3 to 1747×10^3) changes the concentration by less than 0.5%. Therefore, this resolution have be used for all bend simulations.

3.4 CONCLUSIONS

In Chapter 3, the Eulerian-Eulerian model was validated against analytical, numerical, and experimental results. In particular, each term of the particle transport equation, i.e. diffusion, external body force and particle inertia, has been examined. The comparison with the Graetz-Nusselt problem showed that the numerical treatment of diffusion was valid. Moreover, the effect of gravity (body force) on the transport of particles was examined and the results of the Eulerian model was in agreement with the analytical solution of [Finlay \(2001\)](#). Regarding the particle inertia term, the developed model was validated by comparing inertia-induced particle deposition efficiencies in a 90° laminar-flow bend of circular cross section. The model predictions agreed with the analytical results of [Cheng and Wang \(1975\)](#) for low Stokes numbers, whereas slightly overestimated deposition at high Stokes numbers. However, maximum difference was about 10% for the smallest bend curvature ratio, tending to zero as the curvature ratio increases, and therefore sufficiently accurate for practical purposes. More importantly, comparison of the Eulerian model with experimental data ([Tsai and Pui, 1990](#)) was very good for both low and high Dean-number flows ($De = 38$ and $De = 419$), indicating that the approximation used for the inertial term, though based in a low relaxation time expansion, it is valid for higher τ_p as well, rendering the fully Eulerian approach adequate for a wide range of particle sizes. Finally, the predicted deposition sites were in good agreement, at least qualitatively, with the experimental observations of [Tsai and Pui \(1990\)](#).

Part III
APPLICATIONS

In Chapters 4 and 5, the developed Eulerian particle-fluid model is used in order to study the effect of particle inertia in two basic geometries, which however constitute building blocks of the respiratory system; a 90° bend and a bifurcation. In both cases, the focus is on heavy, inert particles ($d_p \geq 1\mu\text{m}$), where both inertial effects and gravitational settling affect particle deposition.

Herein, in continuation of the validating study (Chapter 3), a parametric study of the aerosol flow in the 90° bend is conducted to define the effect of the fluid flow Reynolds number, Re , the bend curvature ratio, R_o , and gravity on the fluid flow and particle behavior. The parameters used in the simulations are summarized in Table 3 and the three orientations of the bend with respect to the acceleration of gravity are depicted in Fig.12.

In the discussion that follows, the different cases are labeled using the initials 'C', 'D', 'I' and 'G' that stand for Convection, Diffusion, Inertia and Gravity, respectively and indicate which mechanisms are taken into account in each simulation. Moreover, the indexes 'x', 'y' and 'z' show the direction on which the acceleration of gravity acts; 'x' corresponds to $\vec{g} = (1, 0, 0)$, 'y' to $\vec{g} = (0, -1, 0)$, and 'z' to $\vec{g} = (0, 0, -1)$.

4.1 BEND: AIR FLOW

As discussed in Section 3.3.2, the fluid flow in curved tubes is characterized by Dean number, given by Eq.(3.17), which provides a measure of the secondary flow field intensity and the axial velocity skewness towards the outer bend wall. However, bend curvature ratio, R_o , affects also the fluid flow in the bend by regulating the balance of the inertial, centrifugal and viscous forces (Tsai and Pui, 1990).

The effect of the bend curvature ratio on the fluid flow axial profiles along the A-A and B-B diameters at both the 45° and 90° cross-sections, is shown in Fig.21 for low Reynolds flow ($Re = 100$) and Fig.22 for high Reynolds flow ($Re = 700$).

For $Re = 100$ it is seen that there is no significant change in the axial velocity profiles, while R_o decreases, i.e. the bend becomes steeper, at the 45° cross-section along both A-A and B-B diameters. At the bend exit (90° cross-section), a difference between the

Fluid temperature T	293 K
Fluid density ρ_f	1.21 kg/m ³
Fluid dynamic viscosity μ_f	1.81×10^{-5} kg/m s
Particle density ρ_p	900 kg/m ³
Particle diameter d_p	5 – 20 μm
Fluid flow Reynolds number Re	100, 300, 500, 700, 1000
Bend curvature ratio R_o	4.4, 5.7, 7, 8.3
Acceleration of gravity (g_x, g_y, g_z)	(1,0,0), (0,-1,0), (0,0,-1)

Table 3: Fluid and particle properties used in the 90° bend parametric study.

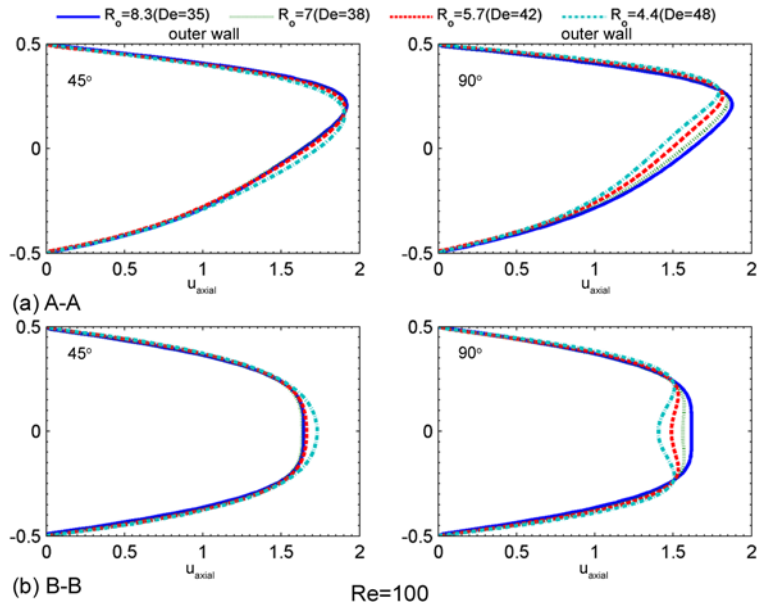


Figure 21: Effect of bend curvature ratio R_o on axial velocity profiles at $\theta = 45^\circ$ (left) and $\theta = 90^\circ$ (right) cross-sections along the diameters (a) A-A and (b) B-B, for low Reynolds number ($Re = 100$).

profiles can be noticed, though not so big. For the high Reynolds number flow ($Re = 700$), however, velocity profiles change significantly in all cases with decreases curvature ratio, especially near the center of the tube (y -axis position equal to zero). Nevertheless, in both Figs.21 and 22, there is no noticeable shifting of the axial velocity profile towards the outer bend wall (along A-A diameters) with R_o .

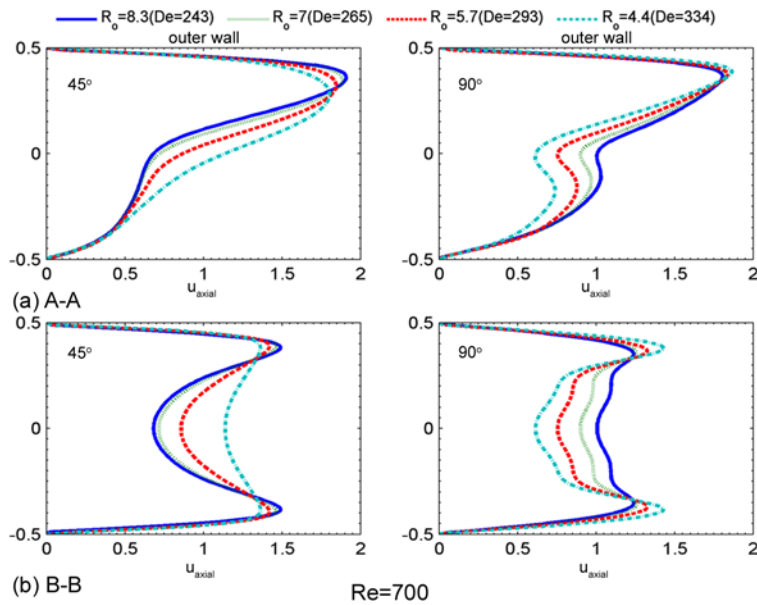


Figure 22: Effect of bend curvature ratio R_o on axial velocity profiles at $\theta = 45^\circ$ (left) and $\theta = 90^\circ$ (right) cross-sections along the diameters (a) A-A and (b) B-B, for high Reynolds number ($Re = 700$).

Dean number is also a function of the flow Reynolds number, the effect of which on the axial velocity profiles is given in Fig.23 for $R_o = 8.3$ and in Fig.24 for a steeper bend

with $R_o = 4.4$. It is shown that axial profiles along both A-A and B-B diameters and in all cases are affected by Re . However, the change in the profiles is bigger when Reynolds increases from 100 to 500, than when it increases from 500-1000 for both curvature ratios. Moreover, one can notice that the velocity profile does not shift further towards the outer wall in the latter case. These features may be an indication that there is a minimum Reynolds number for each curvature ratio, above of which the inertial forces dominate the flow of the fluid over the viscous and centrifugal forces.

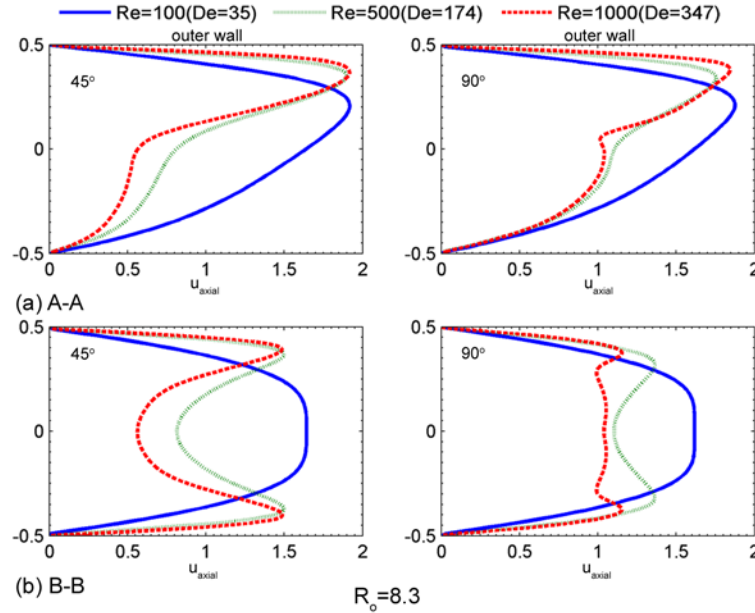


Figure 23: Effect of Reynolds number on axial velocity profiles at $\theta = 45^\circ$ (left) and $\theta = 90^\circ$ (right) cross-sections along the diameters (a) A-A and (b) B-B, for high bend curvature ratio ($R_o = 8.3$).

The effect of both the Reynolds number ($Re = 100, 500$ and 1000) and bend curvature ratio ($R_o = 8.3, 7, 5.7$ and 4.4) on the secondary flow field streamlines is shown in Figs. 25-27, where in addition constant axial velocity contours are depicted. For low Reynolds number (Fig. 25), the shift of the axial velocity towards the outer wall is noticeable, especially at the 90° cross-section, though the characteristics of the secondary flow field do not alter considerably.

In Fig. 26, for $Re = 500$ and all curvature ratios, one can see the shift of the centers of the symmetric vortices towards the inner bend wall, as well as that now the vortices are skewed with respect to the plane of symmetry (A-A diameter). At the exit of the tube (90° cross-section) there are significant changes of the secondary flow as Dean number increases, i.e. R_o decreases; the formation of a second pair of symmetric vortices is observed.

Finally, for the high Reynolds number case (Fig. 27), at the 45° cross-section the vortices move further towards the inner bend wall and closer to the center of the tube. As bend curvature ratio decreases, a second pair of vortices forms at the inner wall. At the 90° cross-section, the secondary flow field changes drastically with increasing Dean number; from one pair of counter-rotating vortices for $De = 347$ to four pairs for $De = 477$.

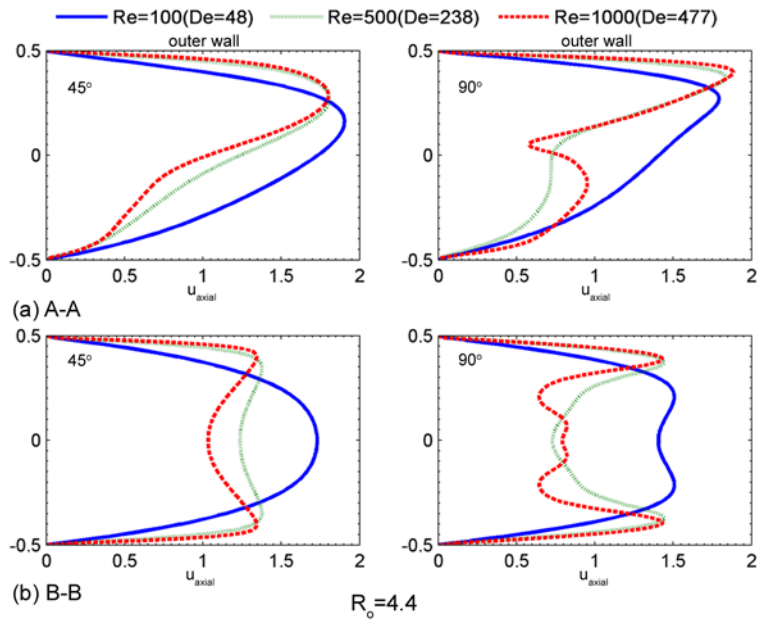


Figure 24: Effect of Reynolds number on axial velocity profiles at $\theta = 45^\circ$ (left) and $\theta = 90^\circ$ (right) cross-sections along the diameters (a) A-A and (b) B-B, for low bend curvature ratio ($R_o = 4.4$).

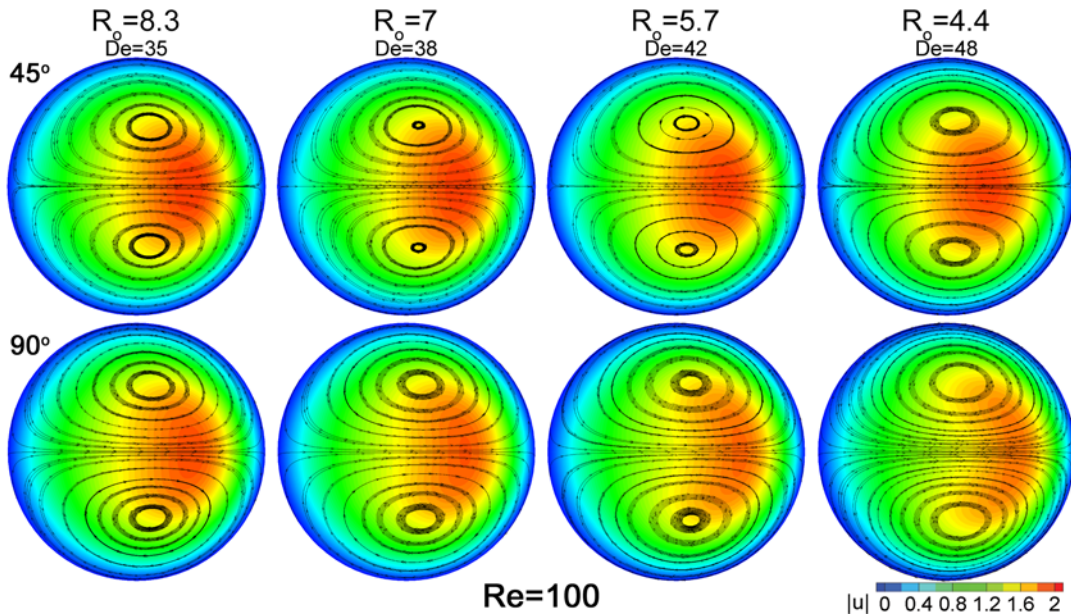


Figure 25: Effect of Dean number on the secondary-flow streamlines and contours of constant axial velocity at $\theta = 45^\circ$ (top) and $\theta = 90^\circ$ (bottom) cross sections for $Re = 100$.

4.2 BEND: AEROSOL PARTICLES

4.2.1 Effect of Gravity

For low Dean number ($De = 38$), gravity influences greatly the particle deposition fraction. The orientation of the tube in the gravitational field is important, too. In the case of vertical tube inlet (CDIGx), the contribution of the settling velocity \vec{v}_s is on the x-direction of the particle convective velocity, thus more particles are driven towards the

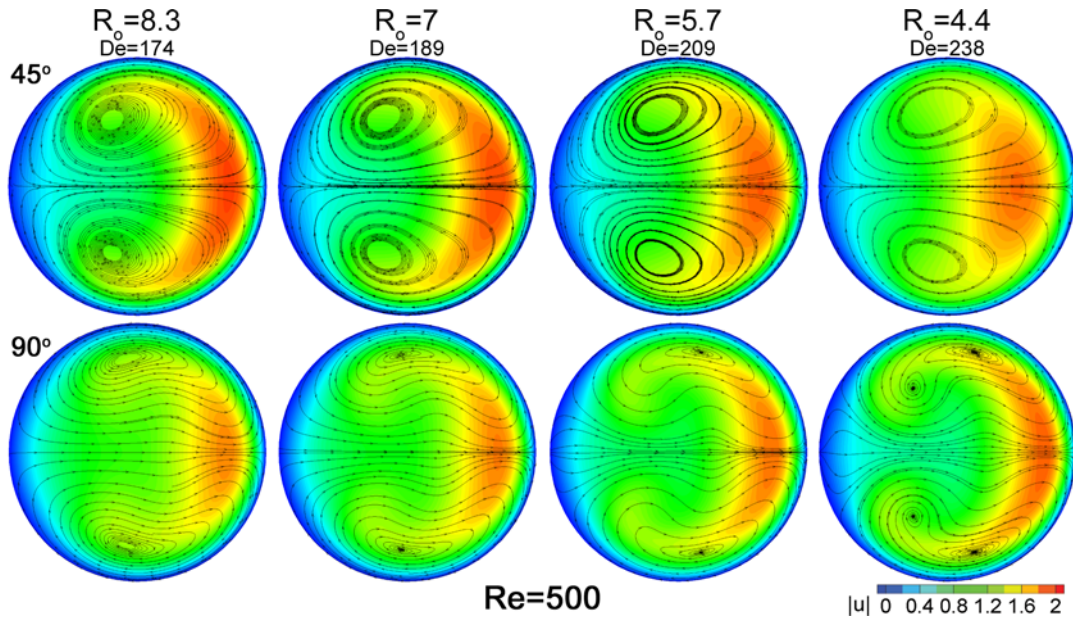


Figure 26: Effect of Dean number on the secondary-flow streamlines and contours of constant axial velocity at $\theta = 45^\circ$ (top) and $\theta = 90^\circ$ (bottom) cross sections for $Re = 500$.

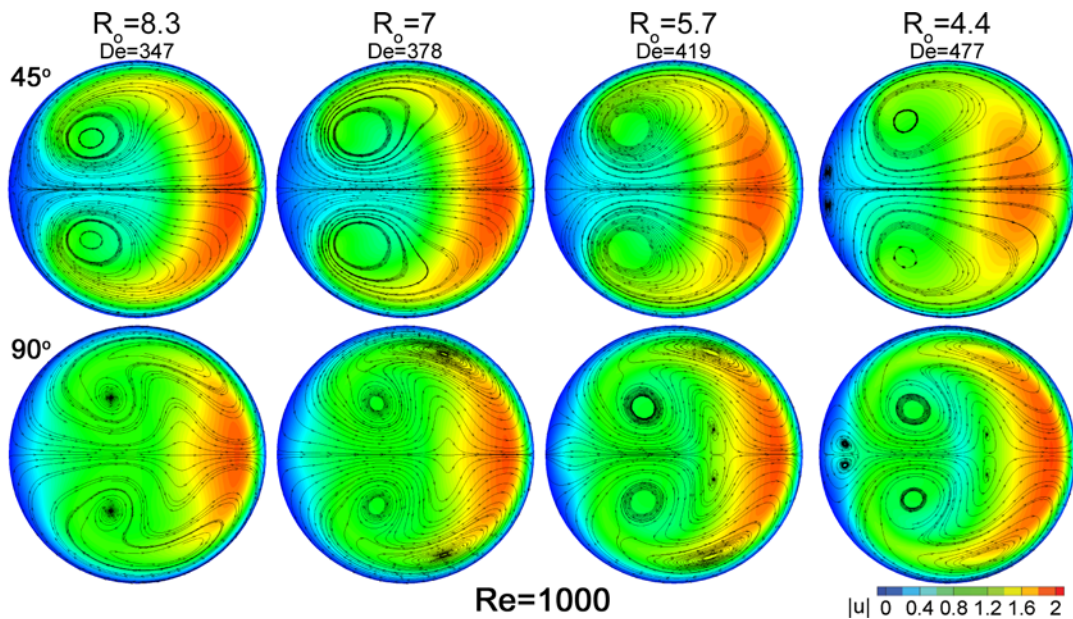


Figure 27: Effect of Dean number on the secondary-flow streamlines and contours of constant axial velocity at $\theta = 45^\circ$ (top) and $\theta = 90^\circ$ (bottom) cross sections for $Re = 1000$.

outer bend wall, where they deposit. This is obvious in Fig.28, where the CDIGx curve is distinctively higher than those of the other orientations.

Deposition fraction in the CDIGy case is comparable to the one without gravity (CDI) though somewhat lower especially at higher Stokes numbers. This is easily understood, if one considers the fact that the settling velocity now contributes to the y-component of \vec{v}_c , which accommodates the change in direction of particles, allowing them to avoid the outer bend wall. Finally, when the whole tube is horizontal and gravity acts on the z-direction (CDIGz case), there is an increased deposition of particles with $St < 1.2$ and decreased deposition fraction for bigger particles (always comparing to the no-gravity

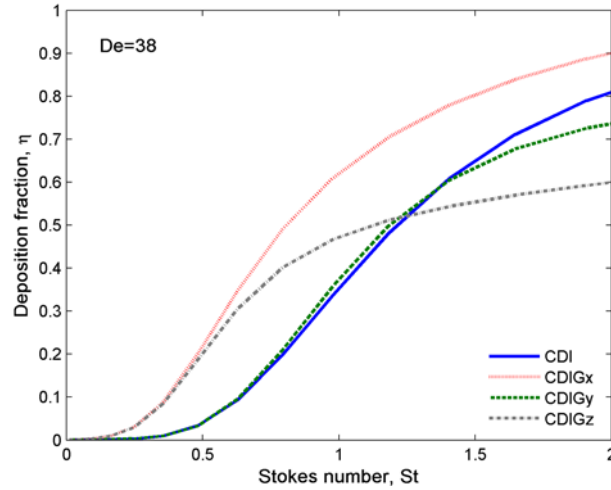


Figure 28: Effect of gravity on particle deposition fraction for $De = 38$.

case). This behavior is attributed to the fact that gravity now acts at the z-component of \vec{v}_c , which is in the direction of the secondary flow field, pushes the particles from the upper to the lower lateral wall of the bend. Smaller particles, i.e. low Stokes number particles, are easily diverted in this direction, whereas the diversion of heavier, inert, particles is lesser and escape before they deposit on the lower wall.

For high Dean number aerosol flow ($De = 419$), the total deposition fraction is higher in all cases. As shown in Fig.29, the effect of the gravity is less pronounced for a vertical inlet (CDIGx) and for an horizontal inlet-vertical outlet (CDIGy), orientations. The stronger secondary flow field results in inertial effects that dominate particle transport. Thus for these cases, there is almost no difference between the CDIGx, CDIGy and the CDI lines.

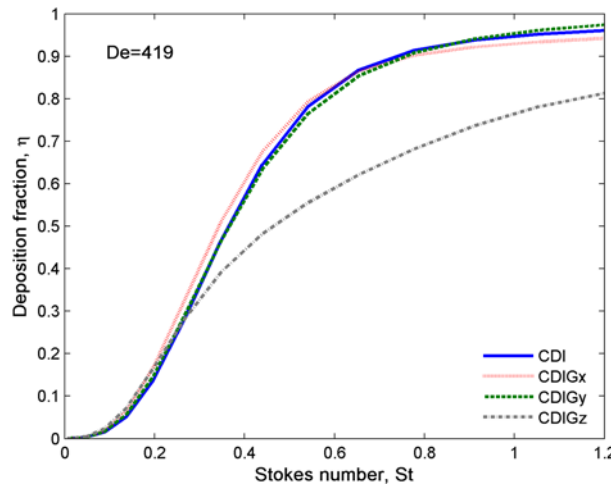


Figure 29: Effect of gravity on particle deposition fraction for $De = 419$.

This is not the case, however, for the totally horizontal tube (CDIGz), as the velocity of gravitational settling pushes the particles away from the upper lateral bend wall, decreasing considerably the deposition fraction especially for heavier particles.

The effect of the orientation of the tube with respect to the acceleration of gravity on particle concentration profiles is shown in Fig.30 for low Stokes number particles and in Fig.31 for high Stokes number particles. For smaller particles, the concentration profiles do not change much between the different orientations for $De = 38$ at both 45° and 90°

cross-sections (Fig.30). When the Dean number increases ($De = 419$), gravity influences clearly only the concentration profiles in the CDIGz case at the 90° cross-section, where particles accumulate in the vicinity of the lower bend wall.

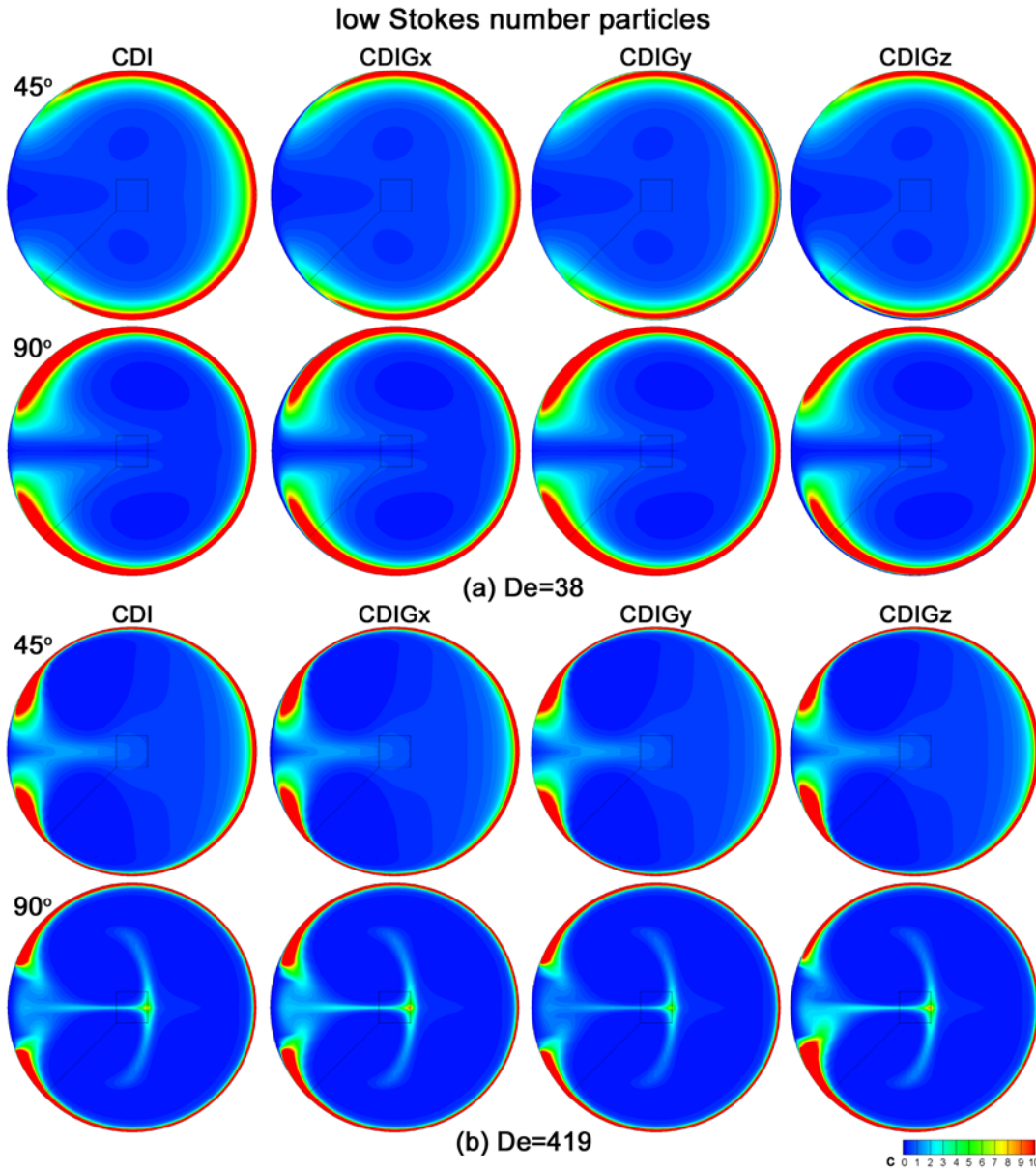


Figure 30: Effect of gravity on particle concentration profiles for low Stokes number particles; (a) $De=38$, (b) $De=419$.

For higher Stokes number particles, this asymmetric accumulation is obvious in both cross-sections and Dean numbers (CDIGz case in Fig.31). Moreover, for these bigger particles there is obvious change in the concentration even in the CDIGx and CDIGy orientations, where gravity does not influence strongly the secondary flow (comparing to the CDI case). The effect is more pronounced for the higher Dean number.

Particle deposition sites are, also, influenced by gravity. In Figs.32 and 33, the concentration at the wall boundary is shown for low and high Stokes number particles, respectively. The deposition patterns of the different tube orientations are compared to the simulations without gravity.

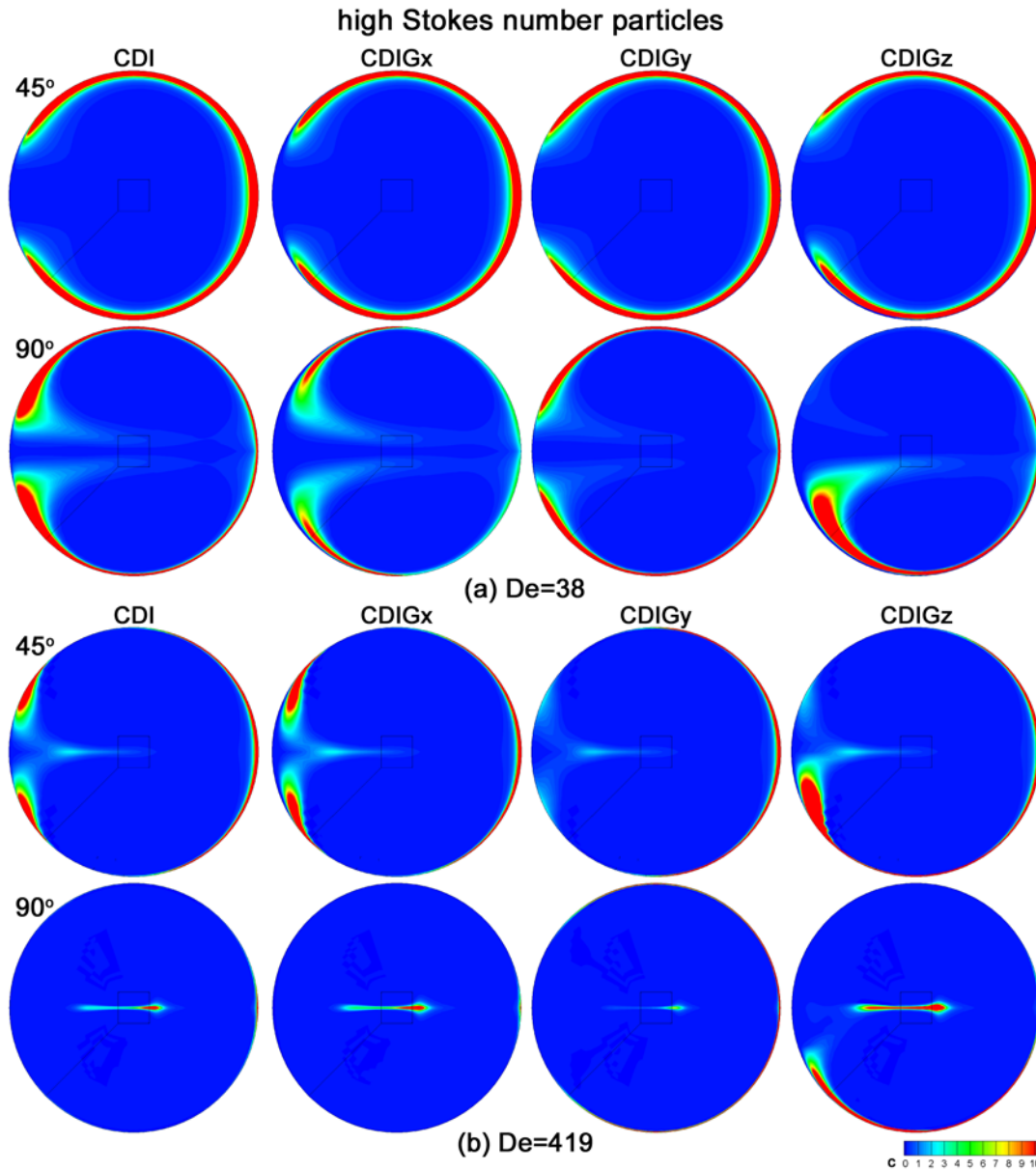


Figure 31: Effect of gravity on particle concentration profiles for high Stokes number particles; (a) $De=38$, (b) $De=419$.

Gravity alters significantly the locations, where particles deposit, the differences being bigger in the case of low Dean number flow ($De = 38$) for both low and high Stokes number particles (Figs.32(a) and 33(a), respectively). For high Dean number ($De = 419$), where inertial effects prevails, the influence of gravity is present though not so striking, especially for the low Stokes number particles.

In general, it is observed that for low Stokes number particles and low Dean number flow, there is deposition at the lateral walls of the bend and the exit tube, and a wider particle-free zone at the inner wall for the CDIGx orientation, whereas for the CDIGy case particles deposit mostly in the lateral walls of the bend and the outer wall of the exit tube. On the other extreme of high Stokes number particles and Dean number flow, particles deposit at a narrower area of the outer bend wall for the CDIGx case and a wider area at the outer wall from the bend through out the exit tube for the cDIGy case.

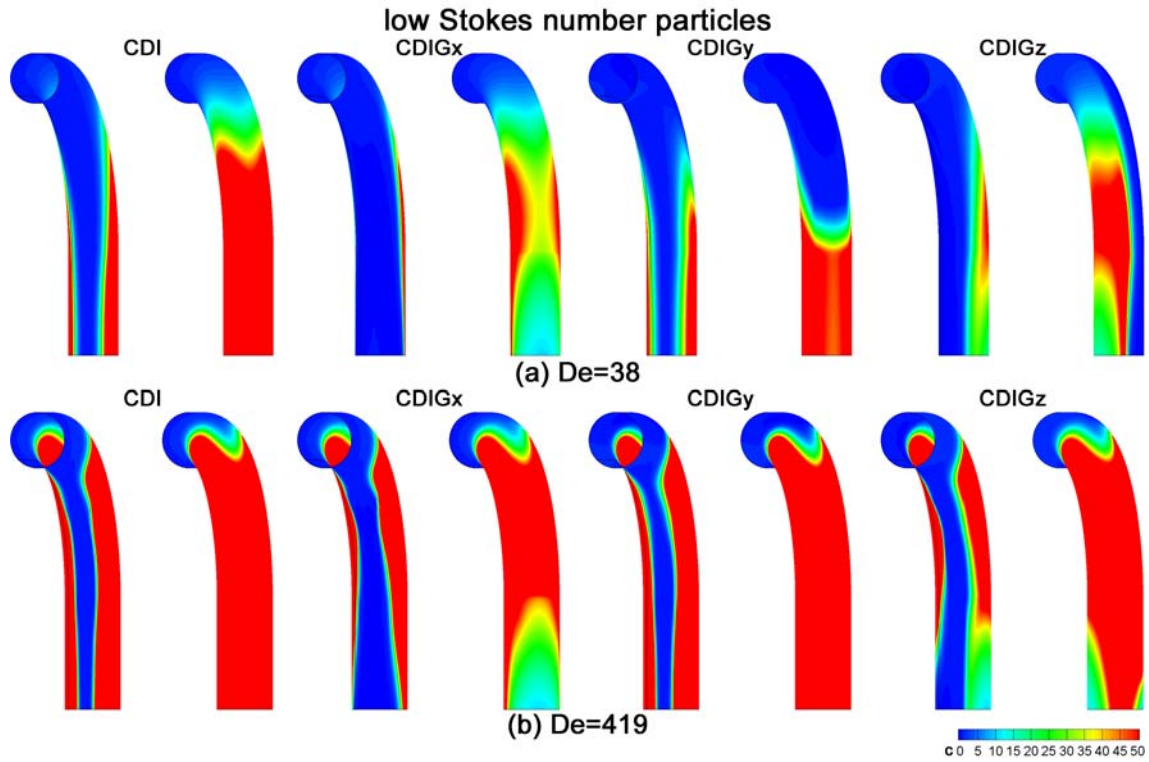


Figure 32: Effect of gravity on particle deposition sites for low Stokes number particles; (a) $De=38$, (b) $De=419$.

For all Stokes and Dean numbers, there is an obvious asymmetry in the deposition sites for the CDIGz orientation.

4.2.2 Effect of Fluid Flow Reynolds Number

The effect of fluid flow Reynolds number on the deposition fraction is shown in Fig. 34 for bend curvature ratio equal to $R_o = 5.7$, where only particle inertia is taken into account (CDI case). From this figure it is clear that an increase in Reynolds number leads to higher deposition fraction. Moreover, it is shown that the growth rate decreases as Re becomes larger. For example, at $St = 0.6$, the deposition fraction is quadrupled from $Re = 100$ to $Re = 300$ (12% compared to 52%), whereas it is only 11% higher for $Re = 700$ compared to $Re = 500$ (77% and 68%, respectively).

In Figs. 35 and 36, the change in particle concentration profiles and deposition sites, respectively, are shown for $R_o = 5.7$. Particle deposition occurs further along the bend and it spreads in a wider area for lower Reynolds number. For high Stokes number particles (Fig. 36(b)), it is clear that as Re increases particles deposit mainly at the outer and lateral walls at the bend and at a slim region of the outer wall of the exit tube, while the particle-free zone at the inner wall becomes wider. These characteristics are also depicted in Fig. 35(b), where at the 90° cross-section it can be observed that the accumulation of particles at the periphery decreases as Reynolds number gets higher.

The effect of fluid flow Reynolds number on particle deposition fraction, concentration profiles and deposition sites for the other bend curvature ratios is analogous to those for $R_o = 5.7$, thus the results are omitted.

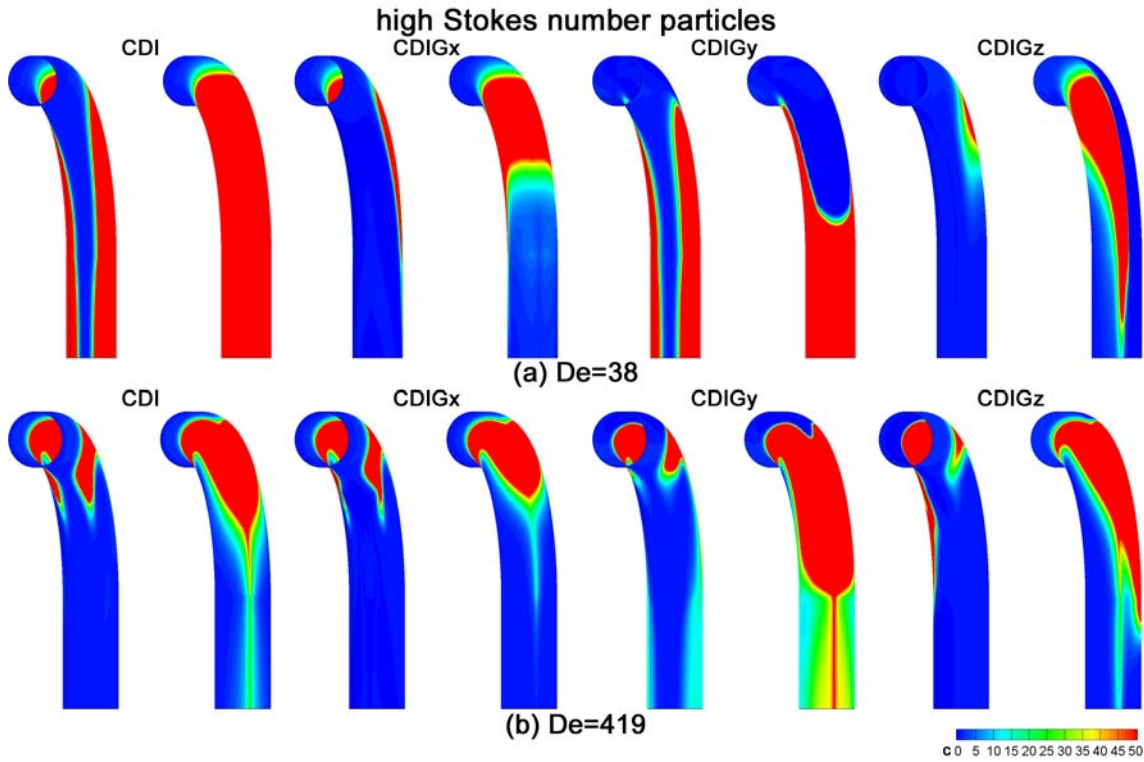


Figure 33: Effect of gravity on particle deposition sites for high Stokes number particles; (a) $De=38$, (b) $De=419$.

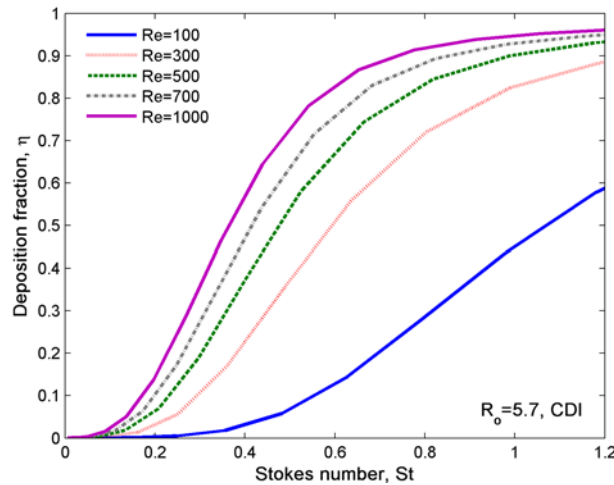


Figure 34: Effect of fluid flow Reynolds number on particle deposition fraction for $R_o = 5.7$.

4.2.3 Effect of Curvature Ratio

The effect of bend curvature ratio, R_o , on the transport of inert particles is also examined. For both low ($Re = 100$, Fig.37) and high ($Re = 100$, Fig.38) Reynolds numbers, deposition fraction increases as the curvature ratio decreases. This is easily understood, if one considers the fact that for the same Reynolds number, the secondary fluid flow and, consequently, the particle inertial effects become stronger as the bend becomes steeper.

Nevertheless, the influence of curvature ratio is more pronounced for low Reynolds number, where pure particle convection, i.e. that driven by the fluid velocity \vec{v} , and

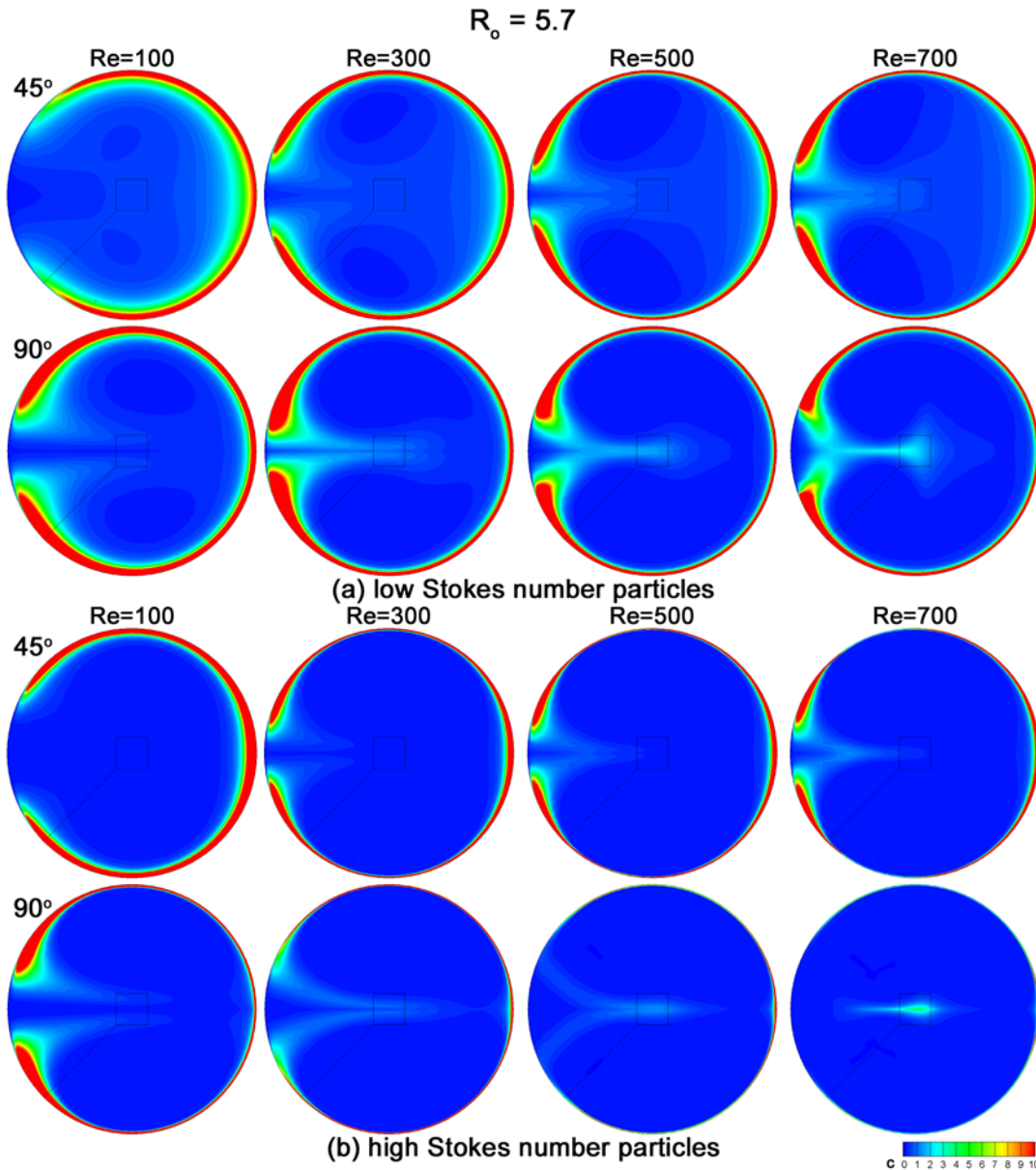


Figure 35: Effect of fluid flow Reynolds number on particle concentration profiles for $R_o = 5.7$; (a) $St = 0.35$, (b) $St = 1.21$

inertial convection, controlled by $\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}$, are comparable and thus their balance changes easily with R_o .

Finally, Fig.39 and 40 show that particle concentration profiles and deposition sites are not affected significantly by changes of the bend curvature ratio.

4.3 CONCLUSIONS

In Chapter 4, a parametric study of aerosol flow in a 90° bend of circular cross-section is performed. In particular the effect of fluid flow Reynolds number and the bend curvature ratio on both the fluid flow and particle transport is examined. The influence that the bend orientation has on particle deposition, is also investigated. For all cases, the simulations refer to heavy, inert particles ($5\mu\text{m} < d_p < 20\mu\text{m}$).

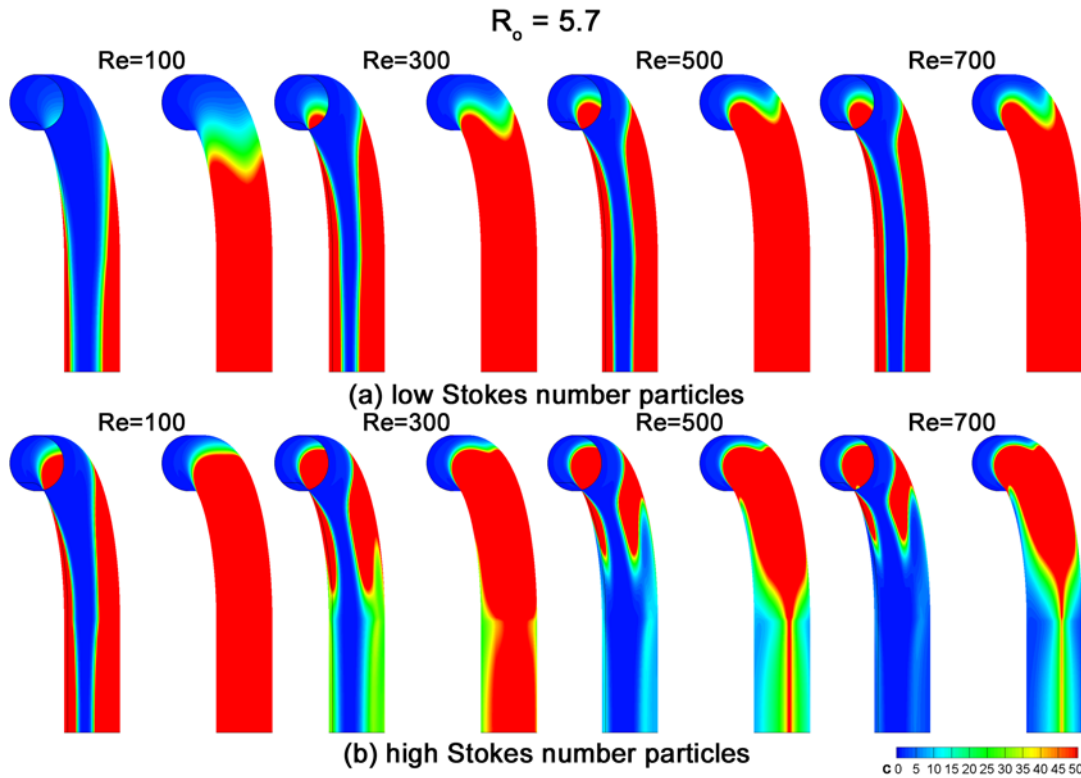


Figure 36: Effect of fluid flow Reynolds number on particle deposition sites for $R_o = 5.7$; (a) $St = 0.35$, (b) $St = 1.21$

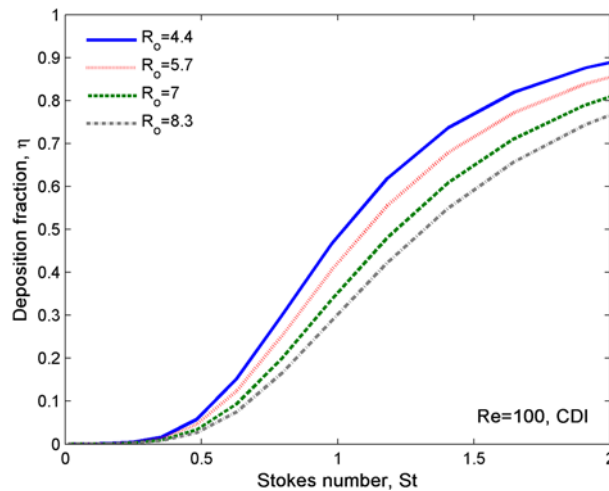


Figure 37: Effect of curvature ratio on particle deposition fraction for $Re = 100$.

In agreement with earlier studies (cf. Tsai and Pui (1990)), the analysis shows that both the axial profiles and the secondary flow characteristics depend on the flow Dean number, which is, in turn, a function of the flow Reynolds number and the bend curvature ratio. Thus, the impact of these two parameters on the fluid flow is separately investigated.

The analysis shows that curvature ratio affects differently the axial velocity profiles and the structure of the secondary flow field for low and high Reynolds numbers. Although in the former case ($Re = 100$) the flow is almost independent of the bend curvature ratio, for $Re > 500$ the influence of R_o is obvious on velocity profiles, especially at the tube

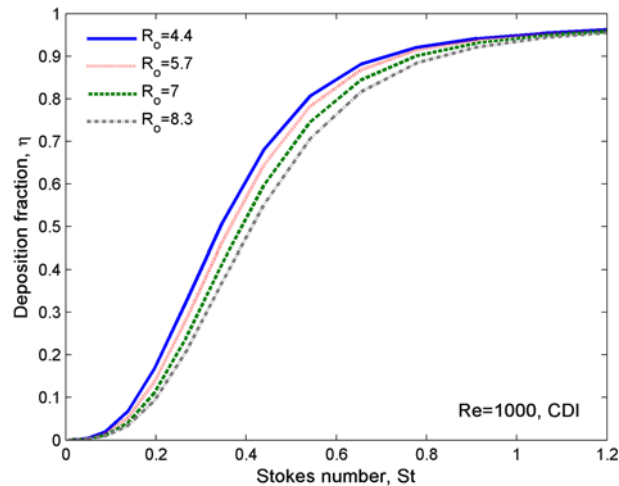


Figure 38: Effect of curvature ratio on particle deposition fraction for $Re = 1000$.

center, as well as on the secondary flow, where new pairs of symmetric vortices form with decreasing curvature ratio (steeper bend). For all Reynolds numbers, however, there is no shifting of the axial velocity profiles towards the outer bend wall as the curvature ratio decreases.

On the other hand, the effect of Reynolds number on the fluid flow in the bend is significant regardless of the curvature ratio. In particular, there seems to be a minimum Re , above of which the axial velocity profile does not move further towards the outer bend wall (in both $R_o = 4.4$ and $R_o = 8.3$ cases), implying that the inertial forces dominate and the centrifugal ones cannot influence further the fluid flow in the bend. Moreover, one can notice that for a given bend curvature ratio, increase of Reynolds number leads to the shifting of the secondary flow vortices towards the inner bend wall and the center of the cross-section, in addition to the formation of new pairs of symmetric vortices, which is especially obvious at the 90° cross-section (bend exit).

Regarding the transport of inertial particles in the bend, the previous analysis shows that gravitational settling is an important deposition mechanism and should not be a priori neglected for such particles. The orientation of the tube with respect to the acceleration of gravity, is more important for low Reynolds number aerosol flows, where inertial effects are weaker. For $Re = 100$ and comparing to simulations without gravity (CDI), deposition fraction for the CDIGx case is considerably higher for the whole range of particle sizes under study, for the CDIGy case is comparable and for the CDIGz deposition is higher for particle Stokes numbers less than unity and lower for bigger particles. On the other hand, for $Re = 1000$, CDI, CDIGx and CDIGy orientations yield comparable deposition fractions, whereas deposition for the CDIGz orientation is considerably lower.

The orientation of the tube influences, also, the particle concentration profiles. For low Stokes number particles concentration profiles do not change significantly for the CDIGx and CDIGy cases compared to the CDI for both low and high Reynolds numbers, whereas for high Stokes number particles there are obvious differences between the aforementioned cases (especially for higher Dean number aerosol flow). At the concentration profiles for the totally horizontal tube (CDIGz), however, the asymmetric accumulation of particles towards the lower lateral bend wall can be noticed even for the low Stokes number particles.

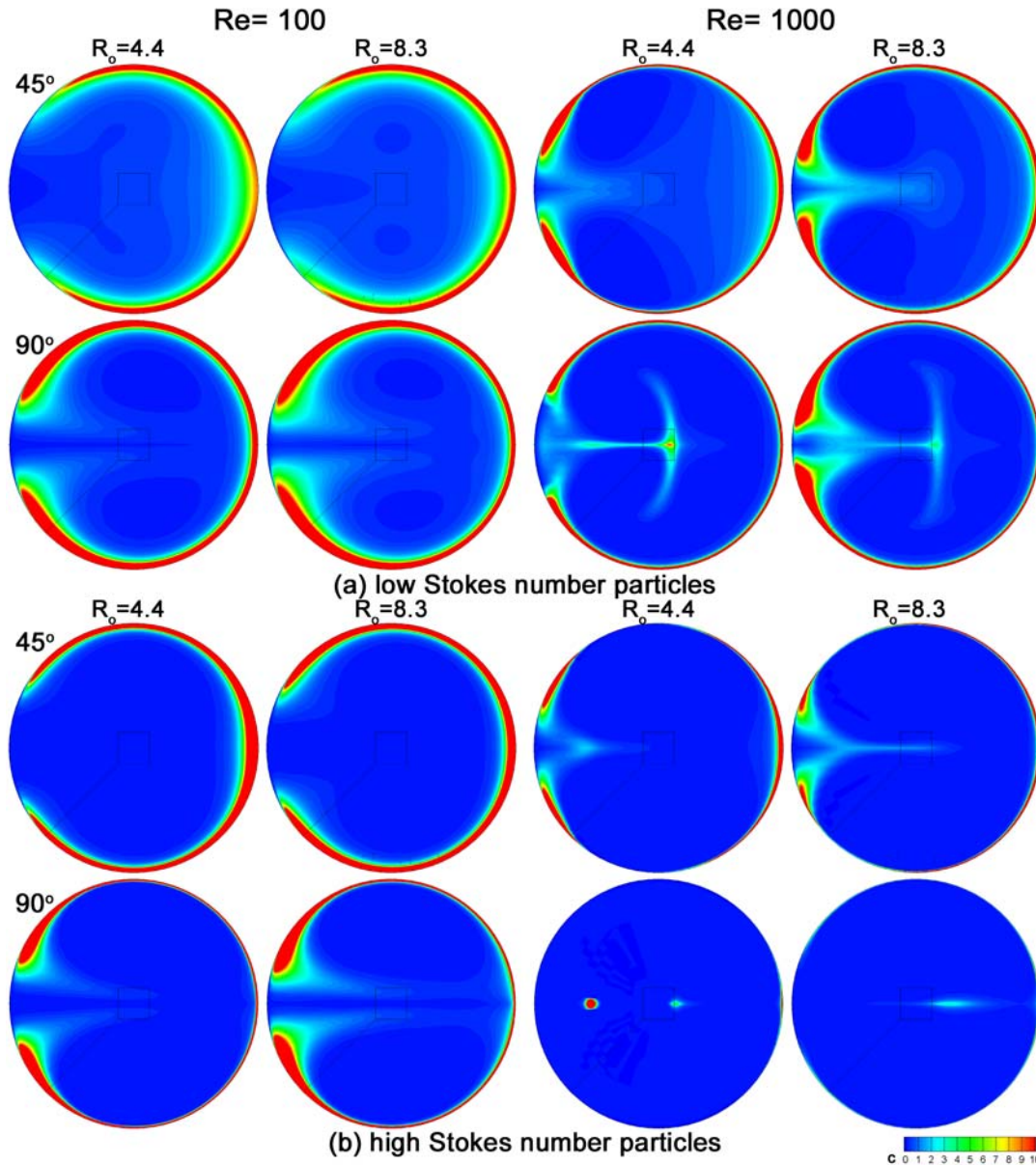


Figure 39: Effect of curvature ratio on particle concentration profiles; (a) low Stokes number particles, (b) high Stokes number particles.

Moreover, gravity alters significantly the locations, where particles deposit. The differences between the various bend orientations are more pronounced for low Dean number flows regardless the size of the particle, whereas for high Dean number flows, where inertial effects prevail, the changes are not so striking. For all Stokes and Dean numbers, there is an obvious asymmetry in the deposition sites for the CDIGz orientation.

In addition, the influence of Reynolds number and bend curvature ratio on inertial particle transport is studied, without taking into account gravity (CDI case). The impact of Reynolds number on particle deposition fraction is rather straightforward; deposition fraction increases with increasing Reynolds number. However, it is noticed that the rate of the increase becomes smaller. Particle concentration profiles and deposition sites are affected by Reynolds number, the differences being more obvious for high Stokes number particles.

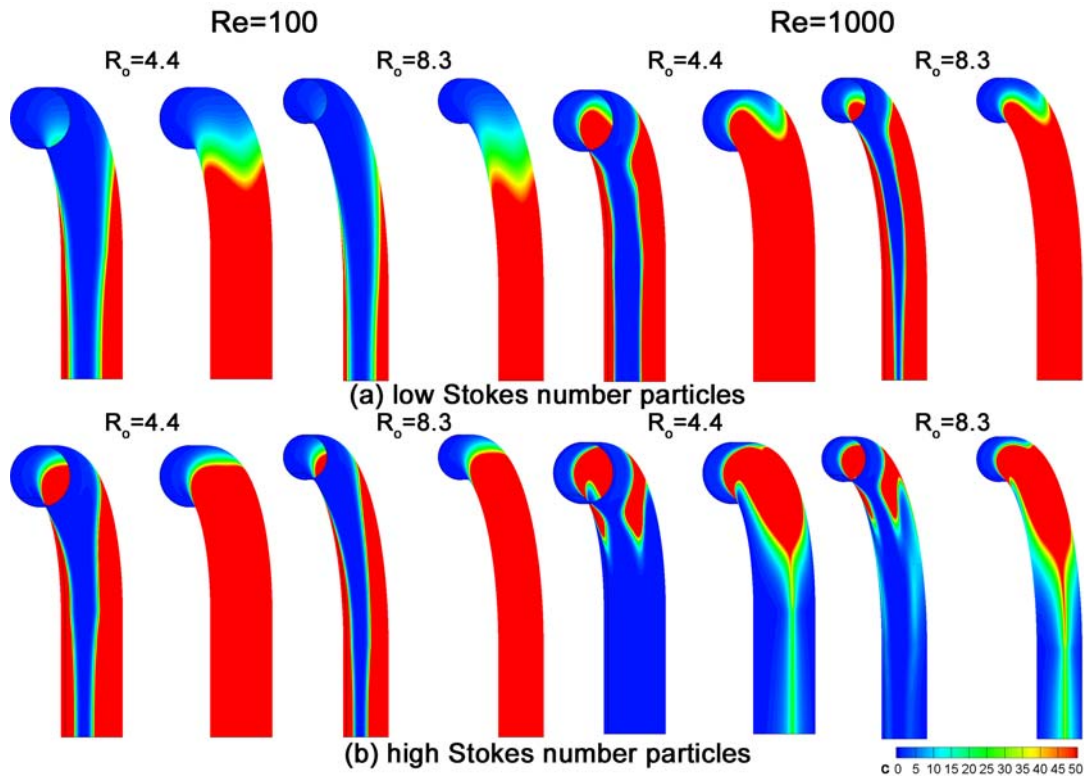


Figure 40: Effect of curvature ratio on particle deposition sites; (a) low Stokes number particles, (b) high Stokes number particles.

Finally, the analysis shows that, in correlation with what happens to the fluid flow, the bend curvature ratio is important for the transport of particles only for low Reynolds number flows. In this case, deposition fraction increases with decreasing R_o , that is as the bend becomes steeper and thus the inertial effects stronger. Moreover, it is shown that the patterns of particle concentration profiles and deposition sites are not particularly changed with the bend curvature ratio.

PARTICLE INERTIAL EFFECTS: PHYSIOLOGICALLY REALISTIC BIFURCATION

Aerosol flows in bifurcations are of great importance for biomedical applications, because this geometry can be considered a building block of the lungs. Estimation of internal dose from inhalation of toxic particulate material is of interest to toxicologists, health-care providers and regulators of air-quality standards (Kleinstreuer et al., 2008). Conversely, there are numerous applications that aerosols are used as drugs, e.g. for the treatment of asthma and chronic obstructive pulmonary disease, where the delivery of the particulate matter in specific sites of the respiratory tract is crucial for their effectiveness.

In the literature, one can find experimental, analytical and computational studies regarding the transport and deposition of particles in single, double or multiple bifurcations. However, aerosol flows in these complex geometries depend on many different parameters and phenomena, thus generalized conclusions are not always reached (Annapragada and Mishchik, 2007).

Early theoretical studies used idealized flow fields and simplifying assumptions regarding the mechanisms and the geometry in order to predict transport and deposition of particles in bifurcations (Agnew et al., 1984; Cai and Yu, 1988; Balásházy et al., 1990, 1991; Gawronski and Szewczyk, 1986). These studies resulted in different deposition formulas, which compared fairly well with the available experiments.

There are experimental studies, where a hollow cast of the tracheobronchial tree in addition to one or more parts of the upper respiratory tract, such as the larynx and the nasal or the oral cavity, were used for measurement of particle deposition in the human respiratory cast. For example, Schlesinger and coworkers (Schlesinger et al., 1977) measured deposition of particles with mean aerodynamic diameters between 2.5 and 8.1 μm in a hollow cast of the larynx and the tracheobronchial tree under steady inspiratory flow, and showed that these particles deposit preferably at bifurcations. Moreover they concluded that deposition presented a maximum in the third lung generation (G_3). Later, Cheng et al. (1999) used a cast of the oral airway, which included the oral cavity, the pharynx, the larynx, the trachea and three bronchi generations, in order to study the deposition of particles (0.93 – 30 μm) under different flow rates. They found that impaction is the dominant mechanism, as deposition efficiency depends primarily on the Stokes number.

However, most of the studies, either experimental or numerical, focus on a specific part of the respiratory tract, usually on two or three consecutive generations of the lungs, therefore in particle transport and deposition in a single or double bifurcation.

Kim and Iglesias (1989) studied experimentally deposition in a Y-shaped bifurcation of circular cross-section of monodispersed oil droplets of 3, 5 and 7 μm , varying the branching angle and symmetry as well as fluid flow Reynolds number ($Re = 1132 - 3397$) and flow patterns in each of the branches. They found that deposition occurs near the bifurcation and increased with increasing Stokes number, whereas it is not affected significantly by branching angles lower than 45° , branching asymmetry and flow patterns in the daughter branches for the tested particles and Reynolds numbers. Moreover, they showed that bend models, such as those by Pui et al. (1987); Cai and Yu (1988); Cheng

and Wang (1981), cannot realistically describe the deposition in bifurcating airways, as previously assumed on the grounds of the geometrical similarity of a bifurcation to a system of two adjacent bends.

This result triggered further experimental works on the aerosol flow in bifurcations. Kim et al. (1994) measured deposition of monodispersed particle populations in a symmetrical single bifurcation of circular cross-section under steady-state flow conditions. Particle diameter, d_p , air flow Reynolds number, Re , bifurcation angle and parent to daughter diameter ratio served as problem parameters. The study showed that inertial impaction was the most significant deposition mechanism for the particle sizes under investigation ($d_p \geq 1\mu\text{m}$) and the majority of particles deposit in a narrow region at the top of the carinal ridge. Moreover, they found that bifurcation angle, parent to daughter diameter ratio and flow Reynolds number may influence the local particle deposition patterns, but did not affect significantly the total deposition fraction. The latter depends only on the Stokes number and increases monotonically with it. Their results were in agreement with earlier findings of Johnston et al. (1977). Experimental studies in double bifurcations reached similar conclusions (Kim and Fisher, 1999; Oldham et al., 2000; Miguel et al., 2004). In addition, these studies concluded that deposition in the second bifurcation is generally lower than the one in the first, a fact that is attributed to the fluid flow downstream of the first bifurcation.

Apart from the experimental works, there are also many computational studies of the fluid-particle flow in branching airways. All of them treat the fluid flow using an Eulerian formulation, but the majority of the studies adopt a Lagrangian approach for the particulate phase. Lee and Goo (1992) simulated the inertial deposition of particles in a bifurcating channel of square cross-section, assuming equal parent and daughter sizes, and studied the effect of different characteristics of the geometry and the fluid flow, as well as the size of the particles. They showed that both the shape of the carinal ridge, rounded or sharp, and the flow Reynolds number in combination with the bifurcating angle influence the fluid flow field and the particle deposition. Moreover, in a similar study by Asgharian and Anjilvel (1994), the deposition in a single bifurcation of square cross-section based on the geometric characteristics of the third and fourth generations of the lung (G_3 - G_4) was studied. They took into account impaction and sedimentation of particles under steady flow for Reynolds numbers equal to 100 and 1000 and uniform and parabolic inlet fluid velocity profiles. Their results indicated that deposition due to impaction is sensitive in both fluid flow Reynolds number and inlet velocity profile, whereas deposition due to sedimentation is almost independent for particles bigger than $10\mu\text{m}$. More recently, Hofmann et al. (2003) simulated aerosol flow in a single bifurcation of circular cross section, based again on the G_3 - G_4 generations characteristics and for particles in the size range of $1 - 500\text{nm}$. They showed that molecular diffusion is the dominant deposition mechanism for particles smaller than 10nm , whereas interception cannot be neglected for high flow rates and even becomes the major mechanism for particles larger than 20nm .

In the last decade, partly owing to great advances in computational speed and memory, the interest is shifted to the simulation of three or more generations of the tracheo-bronchial tree. Comer et al. (2001a) studied the three dimensional, steady, laminar, inspiratory aerosol flow in a symmetric physiologically realistic model of the third to fifth lung generation (G_3 - G_5), i.e. a double bifurcation. Flow Reynolds number ranged between 500 – 2000 and particle Stokes number between 0.02 – 0.12. In addition, the effect of carinal ridge shape and planar or non-planar configuration of the second bifurcation

G ₃ -G ₄ bifurcation	
Parent diameter, D_1	$5.6 \times 10^{-3} \text{ m}$
Parent length, L_1	$11 \times 10^{-3} \text{ m}$
Daughter diameter, D_2	$4.5 \times 10^{-3} \text{ m}$
Daughter length, L_2	$9.2 \times 10^{-3} \text{ m}$
Bifurcation angle, α_{prb}	35°

Table 4: Geometrical characteristics of G₃-G₄ bifurcation according to Weibel (1963).

were investigated. Their results showed that total deposition efficiency depends almost entirely on the Stokes number. Nevertheless, the shape of the bifurcation, inlet velocity profile and flow Reynolds number have an effect on the particle deposition patterns. Moreover, Comer et al. (2001a) showed that the particle concentration patterns are related to the corresponding secondary flows and that in the first bifurcation, most particles deposit because of inertial impaction. In contrast with the result of Lee and Goo (1992), they found that the shape of the carinal ridge may alter the deposition patterns to some extent, but affects little the total deposition efficiency in the bifurcations.

Other numerical studies of double bifurcations are the ones by Longest and coworkers, who studied the aerosol flows of submicron particles ($d_p \leq 1 \mu\text{m}$) in models of generations G₃-G₅ and G₇-G₉, took into account turbulence and also simulated steady expiratory flow (Longest and Oldham, 2006; Longest and Vinchurkar, 2009; Longest and Xi, 2007). In addition, Zhang and coworkers studied fluid-particle flows in triple bifurcations (Go-G₃ Zhang et al. (2005) and G₃-G₆ Zhang et al. (2002)). Finally, Farkas and Balaszazy (2008) studied the deposition of particles in a five generations tree, whereas Zhang et al. (2009) simulated a 16-generations tree by combining adjustable triple bifurcation units.

All the aforementioned studies use a Lagrangian description of the particulate phase. An Eulerian formulation is adopted by a few researchers but only for the transport and deposition of submicron particles, for which inertial effects are not important (Yu et al., 1996, 1998; Zhang and Kleinstreuer, 2003; Longest and Oldham, 2008). In this section, the developed Eulerian model is used for studying the transport and deposition of inertial particles in a single bifurcation under steady state inspiratory flow. The effect of fluid flow (Reynolds number, asymmetry in the branches) and particle size is investigated.

5.1 GEOMETRY & GRID

A physiologically realistic bifurcation (PRB) based on the geometric characteristics of the bifurcation created by the third and fourth lung generations (G₃-G₄) according to Weibel's model (Weibel, 1963) is used in the simulations (Table 4). These generations are chosen because they have been repeatedly used in literature, for example by Asgharian and Anjilvel (1994); Kim et al. (1994); Comer et al. (2001a), and it was experimentally shown that particles deposition peaks there (Schlesinger et al., 1977).

The PRB geometry is constructed using the Design Modeler application of the commercial CFD package ANSYS 11 and user defined functions. In particular, the equations that describe a curved carinal ridge by Heistracher and Hofmann (1995) are incorporated for the description of the bifurcation region. The centerlines of the parent and daughters tubes and the whole constructed surface of the PRB with the curved carinal ridge are shown in Fig.41(a) and (b), respectively.

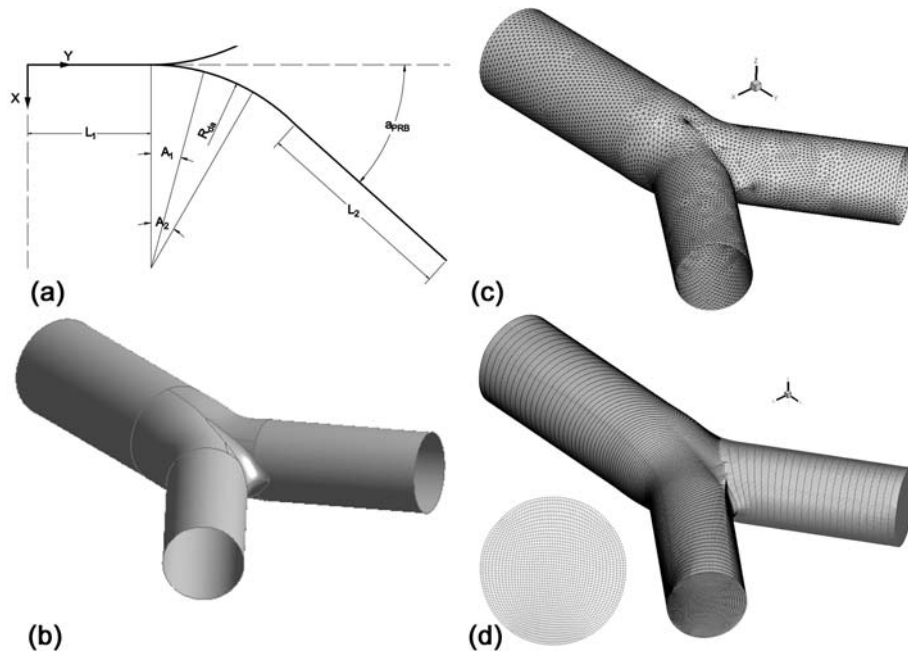


Figure 41: (a) Centerlines and geometrical characteristics of the G₃-G₄ bifurcation (due to geometrical symmetry only one daughter tube is shown), (b) Constructed surface of the G₃-G₄ bifurcation with curved carinal ridge, (c) unstructured surface grid, and (d) structured volume grid and grid cross-section.

The three dimensional multi-block structured grid of the PRB is generated using the methodology and software (in-house and commercial) developed by Makris and coworkers (Makris et al., 2011; Makris and Housiadas, 2011), originally developed for the generation of structured grids of patient-specific geometries obtained from medical images, such as abdominal aortic aneurysms or an abdominal aorta bifurcation. The advantage of this method is the preservation of the naturally complex biological geometries with a structured grid, which has lower numerical diffusion and converges faster compared to an unstructured one (Longest and Vinchurkar, 2007a). The basic steps of the method are: *a*) creation of the geometrical surface (analytically or by image reconstruction techniques using MIMICS or 3DSlicer); *b*) generation of an unstructured grid over the surface; *c*) division of the unstructured grid into open sub-grids (Pyformex or ANSYS ICEM CFD); *d*) transformation of each of the unstructured sub-grids into structured grid; *e*) reassembly of the structured sub-grids to form the initial surface and definition of grid blocks; and *f*) generation of the three dimensional volume grid of the space included by the surface .

In Fig.41(c), the unstructured grid generated on the PRB surface is shown, whereas in Fig.41(d) the structured volume grid, the division into blocks of the geometry as well as the grid cross-section are shown. A grid independence study indicated that a grid resolution of 9×10^5 nodes is sufficient in order to obtain the fluid flow and the particle concentration fields.

5.2 SIMULATIONS

In the physiologically realistic bifurcation study, use is made of the developed fully Eulerian computational model to calculate the fluid flow and particle concentration fields.

Fluid temperature T	293 K
Fluid density ρ_f	1.21 kg/m ³
Fluid dynamic viscosity μ_f	1.81×10^{-5} kg/m s
Particle density ρ_p	900 kg/m ³
Particle diameter d_p	1 – 10 μ m
<i>Rest</i>	
Reynolds number Re	464
Fluid mean inlet velocity v_o	1.24 m/s
<i>Light Exercise</i>	
Reynolds number Re	1132
Fluid mean inlet velocity v_o	3.02 m/s
<i>Heavy Exercise</i>	
Reynolds number Re	1788
Fluid mean inlet velocity v_o	4.78 m/s

Table 5: Fluid and particle properties used in the PRB simulations.

Specifically for the particles, not only deposition fraction, but also concentration profiles are provided and particle deposition sites are indicated. The fluid and particle properties used in the simulations are shown in Table 5.

Flow symmetry is assumed for the three different flow conditions shown, which correspond to inspiration of an adult man during rest ($Re = 464$) and under light ($Re = 1132$) and heavy ($Re = 1788$) exercise. Moreover, for $Re = 1132$ (light exercise) flow asymmetry is examined. If Q_1 , Q_2 are the flows exiting daughter tubes 1 and 2 respectively (Fig.42), then the cases of the flow in tube 1 being double than the one in tube 2, i.e. $Q_1/Q_2 = 2$, as well as tube 2 being totally obstructed, i.e. $Q_2 = 0$, are investigated. The former corresponds to partial obstruction of the flow in the daughter tube 2 and in order to obtain the fluid flow field the wanted flow rates are enforced at the outlets of the daughter tubes, whereas the latter to totally obstructed flow and it is enforced by setting the outlet of the daughter tube 2 a wall boundary.

Fully developed fluid velocity (parabolic) profile and uniform (plug) particle concentration profile at the entrance of the third lung generation (inlet) are assumed for all cases.

In Fig.42, different cross-sections are defined. In particular, A-A cross-section lies at the parent tube in the beginning of the bifurcation region ($y=2.4$), whereas cross-sections B-B' and C-C' are located downstream the bifurcation, at $y=3.5$ and $y=4.5$, respectively. The subscripts 1 and 2 refer to the corresponding daughter tube. Note, however, that in the presentation of the results, the subscript is omitted in the symmetric flow cases.

In addition, in the insert of Fig.42, the diameters H-H and V-V of a cross-section are defined, the first of which lies parallel and the second perpendicular to the plane of the PRB geometric symmetry $z = 0$.

5.2.1 PRB: Air Flow

The effect of Reynolds number to the axial velocity profiles along the diameters H-H parallel (top) to and V-V perpendicular (bottom) to the symmetry plane for the symmetric

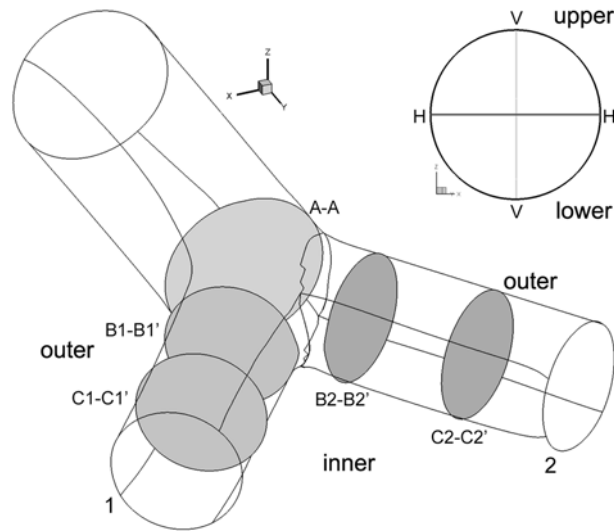


Figure 42: Definition of cross-sections and diameters of interest.

flow case are shown in Fig.43 at the different cross-sections. Upstream the bifurcation (A-A cross-section, left), the axial velocity profile is symmetric and almost independent of the Re along H-H, preserving at large the parabolic profile of the inlet. However, downstream the bifurcation (B-B', centre, and C-C', right, cross-sections), the velocity profiles along H-H diameter are skewed towards the inner PRB wall due to the centrifugal forces exerted on the fluid. The deformation shifts further towards the inner wall of the PRB, in addition to the appearance of a second, much lower, peak of the axial velocity towards the outer wall of the PRB with increasing Reynolds number. The axial velocity profiles along the diameters V-V for the A-A cross-section remain parabolic, whereas for the B-B' and C-C' cross-sections are deformed but remain symmetric with respect to the symmetry plane $z = 0$ of the PRB. These results are in good agreement with various others numerical solutions, such as those by [Balášházy and Hofmann \(1993\)](#); [Comer et al. \(2001b\)](#).

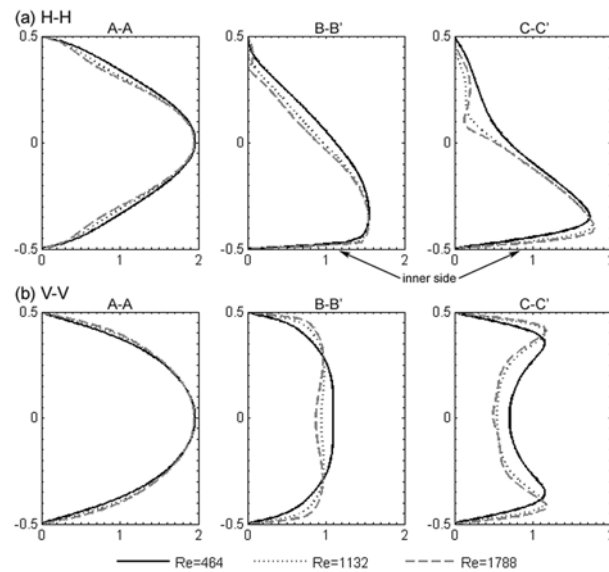


Figure 43: Axial velocity profiles for different Reynolds numbers at cross-sections A-A (left), B-B' (centre) and C-C' (right) for symmetric flow at the diameters H-H (a) and V-V (b).

Likewise, in Fig.44 the effect of flow asymmetry on axial velocity profiles is shown for both daughter tubes of the PRB along diameters H-H (top) and V-V (bottom) for $Re = 1132$. In contrast to the symmetric flow cases, the axial velocity profile at the A-A cross-section along H-H diameter is no longer symmetric. The skewness of the curves is a result of the blockage effect in daughter tube 2 (Comer et al., 2001b), and gets more pronounced in the totally obstructed flow case ($Q_2 = 0$). Downstream the bifurcation, the axial velocity profiles along H-H are still shifted towards the inner PRB wall, but the flow in the second daughter tube is markedly less than the one in the first daughter tube. Moreover, it can be seen in the graphs along H-H diameter for the B₁-B₁' and C₁-C₁' that the fluid accelerates in daughter 1, comparing to the symmetric case, in order to accommodate the excess flow.

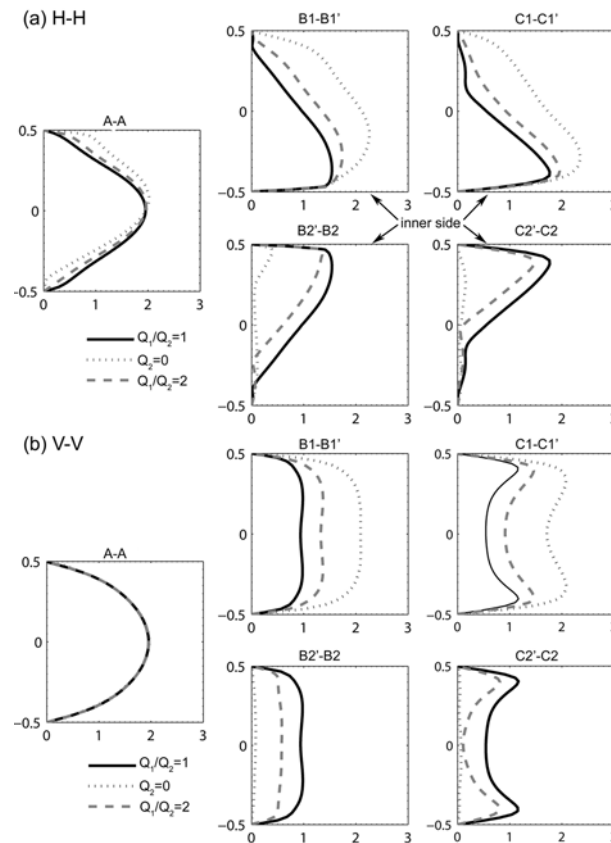


Figure 44: Axial velocity profiles for $Re = 1132$ and asymmetric flow at the diameters H-H (a) and V-V (b). Corresponding cross-sections at both daughter tubes are shown.

The secondary-flow streamlines and contours of constant axial fluid velocity are shown in Fig.45(a)-(c) at cross-sections B-B' and C-C' for the symmetric flow cases (left). Moreover, the contours of constant axial fluid velocity at the geometric symmetry plane $z = 0$ and the velocity vectors at the H-H diameter of the cross-sections are depicted (right). The streamlines of the low Reynolds number secondary flow show the formation of a pair of symmetric, counter-rotating vortices. The centers of the vortices are slightly displaced towards the outer PRB wall at the C-C' cross-section. Moreover, the peak of the axial fluid velocity is located closer to the inner wall. The secondary-flow streamlines for higher Reynolds numbers, $Re = 1132$ and $Re = 1788$, at C-C' cross-section also show two main, symmetric counter-rotating vortices, but their centers are displaced towards the outer PRB wall and they are skewed with respect to the symmetry plane. In addition,

increased centrifugal forces lead to increased fluid flow towards the inner wall. These results are quantitatively in agreement with other numerical simulations Comer et al. (2001b); Longest and Vinchurkar (2007b); Martonen et al. (2001b,a).

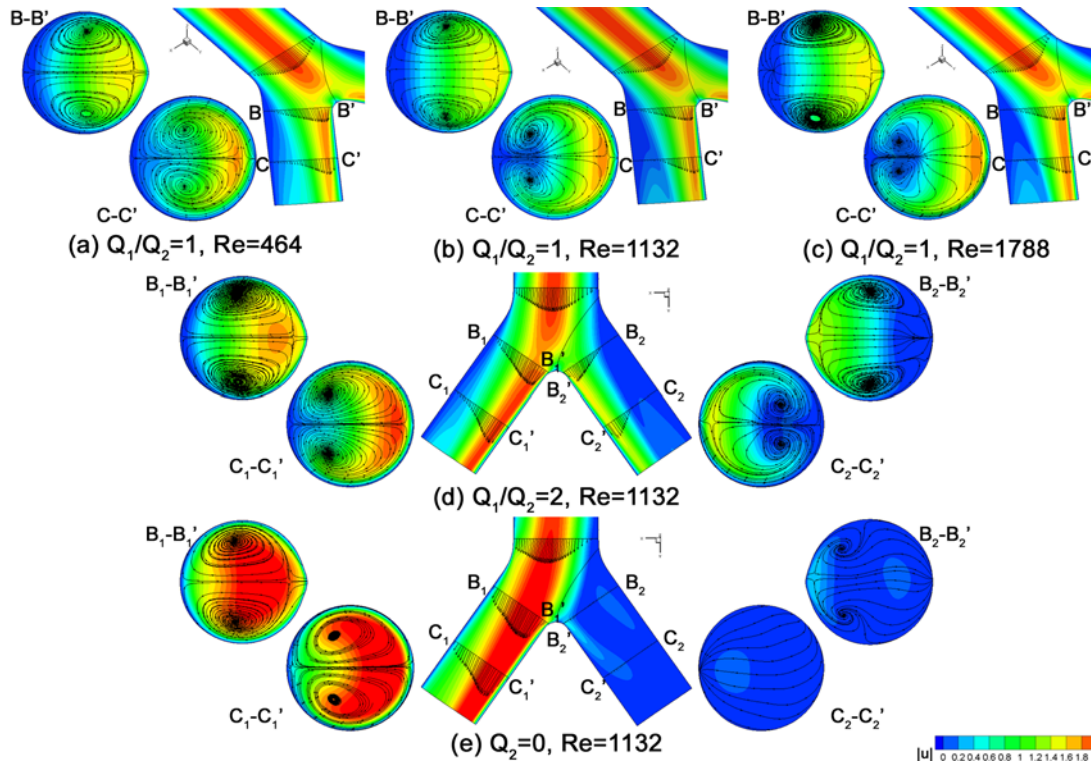


Figure 45: Contour of fluid velocity magnitude and vectors at the plane of symmetry of the PRB ($z = 0$) and secondary flow streamlines and constant velocity magnitude contours at different cross-sections downstream the bifurcation; (a) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 464$, (b) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1132$, (c) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1788$, (d) $Q_1/Q_2 = 2, Re = 1132$, and (e) $Q_2 = 0, Re = 1132$.

Similarly, the secondary flow streamlines and contours of constant axial fluid velocity downstream the bifurcation in both daughter tubes of the PRB are shown in Fig.45 for the asymmetric flows $Q_1/Q_2 = 2$ (d) and $Q_2 = 0$ (e). The flow asymmetry between the daughter tubes is obvious for both the fluid velocity vectors and the velocity magnitude contour. The maximum velocity at A-A cross-section is shifted towards daughter tube 1, the effect being more obvious for $Q_2 = 0$. Comparing the corresponding cross-sections between the daughter tubes, one can notice the differences in the secondary flow, as well. In cross-sections B_1-B_1' and C_1-C_1' of daughter 1 for both cases, there is the development of two counter-rotating vortices with their centers approaching the outer PRB wall, such as those for the symmetric case of Fig.45(b), but the maximum axial fluid velocity is less shifted towards the inner PRB wall. These features also appear, less intense, in daughter tube 2 of the partially obstructed flow case, $Q_1/Q_2 = 2$, as shown in the right part of Fig.45(d). However, this is not the case for daughter tube 2 of the totally obstructed flow, $Q_2 = 0$. There are two counter-rotating vortices at the B_2-B_2' cross-section, but their centers are displaced toward the inner PRB wall, whereas there are no vortices at the C_2-C_2' cross-section. It should be noted that the white background color in these cross-sections (right part of Fig.45(e)), indicates the almost zero fluid velocity in daughter tube 2 in this case.

Closer observation of the fluid velocity vectors in Fig.45, indicate that there are regions in the daughter tubes that flow recirculation occurs, e.g. at C-C' location of Fig.45(c) and at the B2-B2' location Fig.45(e). In Fig.46, the streamlines of the main fluid flow at the plane of geometric symmetry, $z = 0$, are shown for all cases. For the symmetric flow cases, $Q_1/Q_2 = 1$, there is recirculation for the higher Reynolds numbers, $Re = 1132$ and $Re = 1788$, and by optical comparison one notices that the recirculation zone becomes wider with increasing Reynolds number. On the other hand, for the asymmetric flows, recirculation occurs in the obstructed daughter tube, which for $Q_2 = 0$ is very strong.

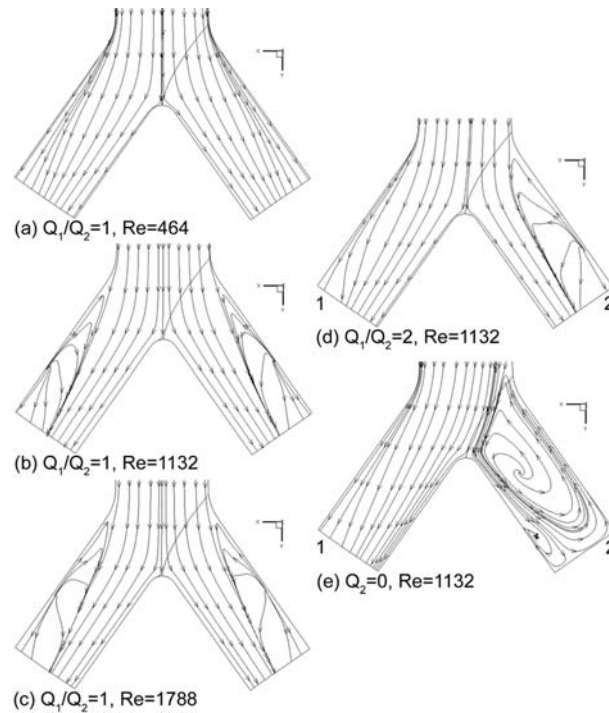


Figure 46: Main fluid flow streamlines at the plane of symmetry of the PRB ($z = 0$). Comparison between different Reynolds numbers for flow symmetry (a,b,c) and $Re = 1132$ and asymmetric flow (b,d,e).

5.2.2 PRB: Aerosol Particles

The flow fields obtained in the previous section are used to calculate particle transport and deposition in the physiologically realistic bifurcation, equivalent to the third and fourth generation of the human lung (G_3 - G_4), with the developed fully Eulerian model. It is reminded that a uniform (plug) particle concentration profile is applied at the entrance of the third generation (G_3) as an inlet condition. The particle diameter ranges between $1\mu\text{m}$ and $10\mu\text{m}$, for which inertial and gravitational effects should be taken into account in the calculations. The orientation of the PRB is such that the unit vector in the direction of the acceleration of gravity is equal to $\hat{g} = (g_x, g_y, g_z) = (0, 1, 0)$, in order to coincide with the orientation of the experimental set-up of Kim et al. (1994). Their findings are compared against the results of the present study.

Total deposition fraction, η , for symmetric flow conditions ($Q_1/Q_2 = 1$) as a function of the particle Stokes number, St , is presented in Fig.47 for different Reynolds numbers. The results of the Eulerian model are in good agreement with the experimentally derived

results of Kim et al. (1994) up to $St = 0.08$ for the range of Reynolds number under study, whereas the present model underestimates deposition fraction for higher Stokes numbers.

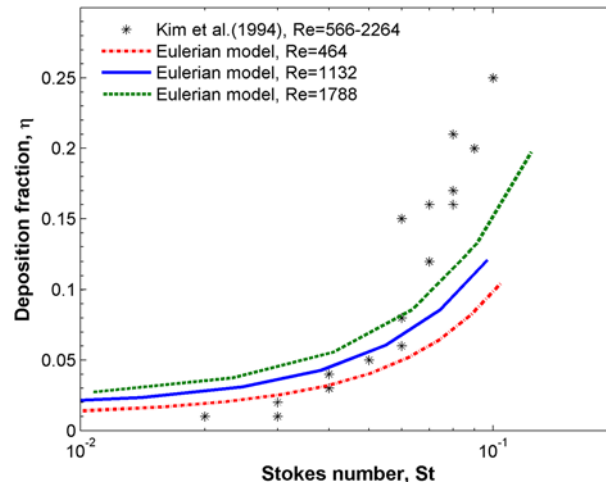


Figure 47: Total deposition fraction for symmetric flow. Comparison with the experimental results of Kim et al. (1994).

The effect of asymmetric fluid flow on the total deposition fraction is shown in Fig.48. This results correspond to Reynolds number equal to 1132. From this figure shows that partially obstructed flow in daughter 2, which results in a $Q_1/Q_2 = 2$ flow ratio, does not affect significantly total deposition fraction in the PRB comparing with the symmetric flow case ($Q_1/Q_2 = 1$). This finding is consistent with the experimental results of Kim and Fisher (1999), who studied flow asymmetry in a PRB cast of lung generations three to five (G_3 - G_5). From Fig.48, it is also obvious that if $Q_2 = 0$ in the single PRB under study here, total deposition fraction is considerably lower than in $Q_1/Q_2 = 1$ or $Q_1/Q_2 = 2$ cases.

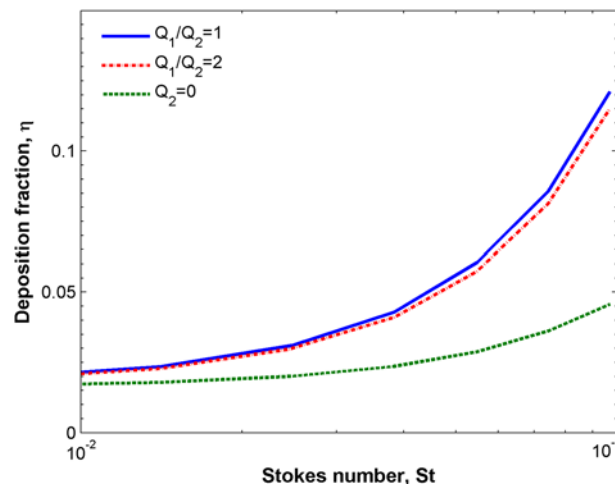


Figure 48: Total deposition fraction for asymmetric flow ($Re = 1132$).

The cumulative particle deposition fraction for particles with Stokes numbers $St = 0.01$ (low) and $St = 0.01$ (high) along the axis of the PRB is shown in Figs.49(a) and 49(b) versus the fluid flow Reynolds number and flow asymmetry, respectively. In both cases, it is obvious from the diagrams that particle deposition occurs mainly in the bifurcation

region and, in particular, at the bifurcation ($y \approx 3.5$). Moreover, for $St = 0.1$ there is also deposition downstream the bifurcation for all Reynolds numbers under symmetric flow and also for totally obstructed flow ($Q_2 = 0$). In the latter case, there is also increased deposition in the region upstream the bifurcation, probably because the strong flow recirculation in the daughter tube 2, as shown in Fig.46(e), sends particles back to this region, increasing the number of particles available to deposit there.

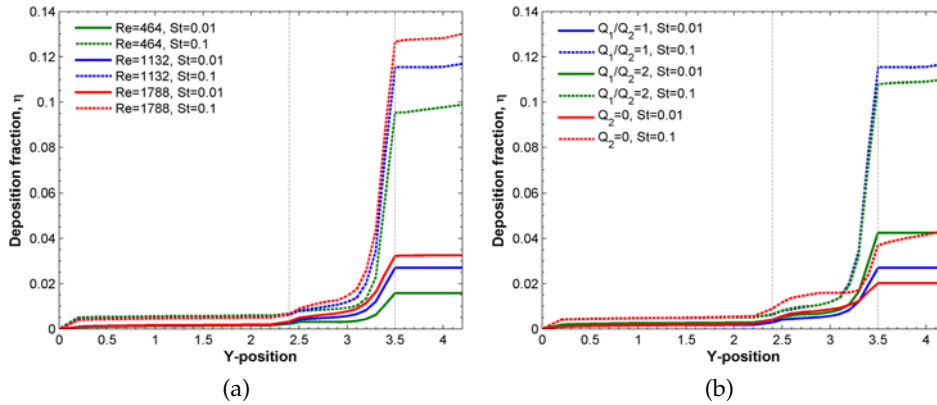


Figure 49: Deposition fraction along the axis of the bifurcation in (a) the case of symmetric flow for different Reynolds numbers and (b) the case of $Re = 1132$ for symmetric ($Q_1/Q_2 = 1$) and asymmetric ($Q_1/Q_2 = 2, Q_2 = 0$) flows.

The effect of flow Reynolds number under symmetric flow conditions on the concentration profiles and particle deposition sites are shown in Figs.50(a)-(c) and 51(a)-(c) for low ($St = 0.01$) and high ($St = 0.1$) particle Stokes number, respectively. For $St = 0.01$ (Fig.50), deposition occurs mainly at the bifurcation and at the middle of the upper and lower PRB walls. Deposition is also high at the bifurcation in the case of high Stokes number (Fig.51), but there is also significant deposition on the upper and lower PRB walls, which moves toward the outer wall and further downstream in the daughter tubes as Reynolds number increases.

If the particle concentration profiles at the cross-sections B-B' and C-C' of these figures are observed in conjunction with the secondary flow streamlines of Fig.46, it is shown that low Stokes number particles ($St = 0.01$) accumulate at the periphery of the vortices, whereas higher Stokes number particles ($St = 0.1$) are pushed further towards the PRB walls by the secondary flow. In fact, higher Reynolds number flows lead to accumulation of particles at the vicinity of the outer PRB wall, as the centers of the vortices in this case are also closer to the outer wall, and this is more pronounced further downstream the daughter tubes, i.e. at C-C' cross-section rather than at B-B'. Thus, the chance of a highly inertial particle to deposit at the outer wall of the PRB and towards the exit of the PRB increases monotonically with Reynolds number.

Figures 50(d)-(e) and 51(d) and (e), present the effect of flow asymmetry on particle deposition sites along the PRB and concentration profiles at cross-sections downstream the bifurcation for $St = 0.01$ and $St = 0.1$, respectively. The patterns for the partially obstructed flow ($Q_1/Q_2 = 2$), resemble those of the symmetric case with the same Reynolds number ($Re = 1132$). However, deposition in daughter 2 occurs earlier along the tube and mostly on the upper and lower walls, in contrast with deposition in daughter 1, where peak deposition occurs towards the exit and the outer PRB wall. Moreover, the less intense secondary flow in daughter tube 2 (Fig.46(d)) allows for the particles to

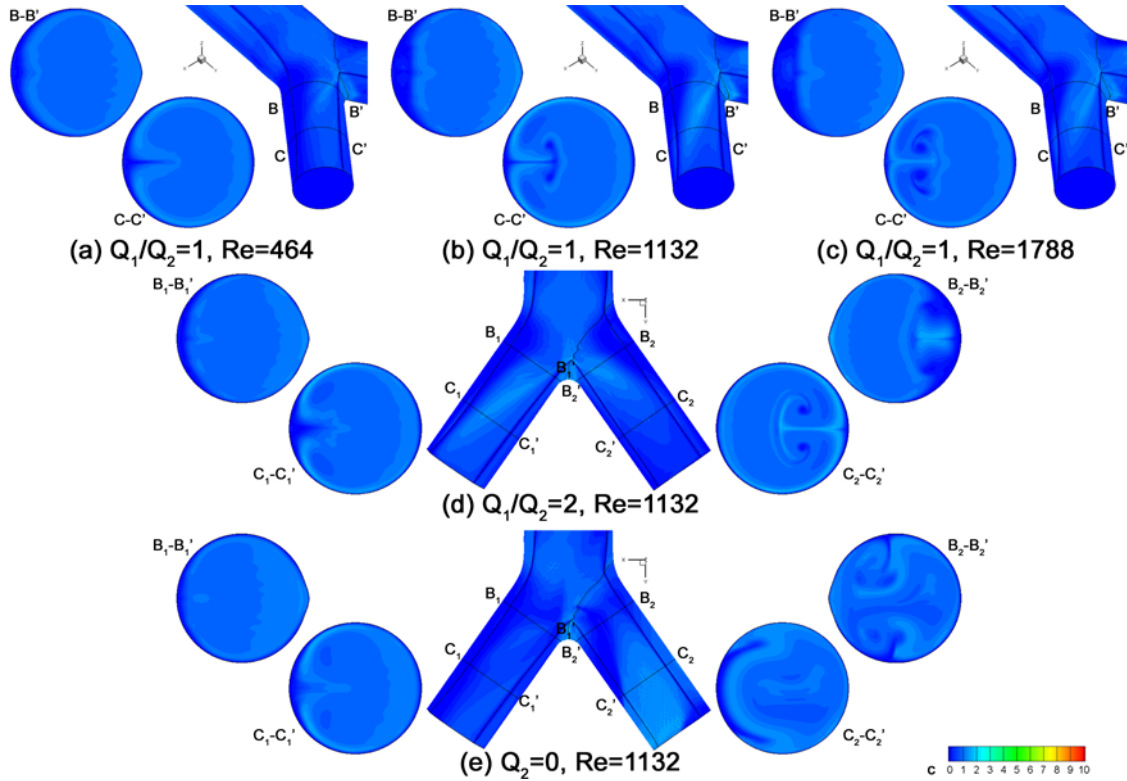


Figure 50: Particle concentration profiles at cross-sections downstream the bifurcation and particle deposition sites on the PRB wall for low Stokes number, $St = 0.01$; (a) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 464$, (b) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1132$, (c) $Q_1/Q_2 = 1, Re = 1788$, (d) $Q_1/Q_2 = 2, Re = 1132$, and (e) $Q_2 = 0, Re = 1132$.

accumulate at and outline better the periphery of the vortices, as it is shown by comparing cross-sections B_1-B_1' and C_1-C_1' with B_2-B_2' and C_2-C_2' , respectively, in Figs.50(d) and 51(d). These features are particularly obvious for the higher Stokes number.

In the case of $Q_2 = 0$, it is shown that there is particle deposition in the totally obstructed daughter tube 2, which in the case of $St = 0.01$ (Fig.50(e)) is comparable to the deposition at the bifurcation. Particles that enter daughter 2 are pushed to the periphery of the recirculation zones, shown in Fig.46(e), and probably some of them are trapped between them increasing the chances to deposit in the region. This is true for high Stokes number particles (Fig.51(e)) as well, where deposition occurs also at the outer wall and towards the exit of daughter tube 1.

Low Stokes number particles deposit in a wider region of the PRB daughter tubes including the inner wall (Fig.50), whereas there are regions on the outer wall that are almost free of particles. On the other hand, deposition for high Stokes particles (Fig.51) is more localized towards the outer wall and less particles deposit on the inner PRB wall. In all studied cases, there is a region of the outer wall, at the beginning of the daughter tubes opposite the bifurcation, where almost no particle deposition occurs. Finally, it should be noticed that even if the total deposition fraction does not differ greatly between the various flow cases, with the $Q_2 = 0$ case exception, the particle deposition sites and concentration profiles are affected by the flow conditions.

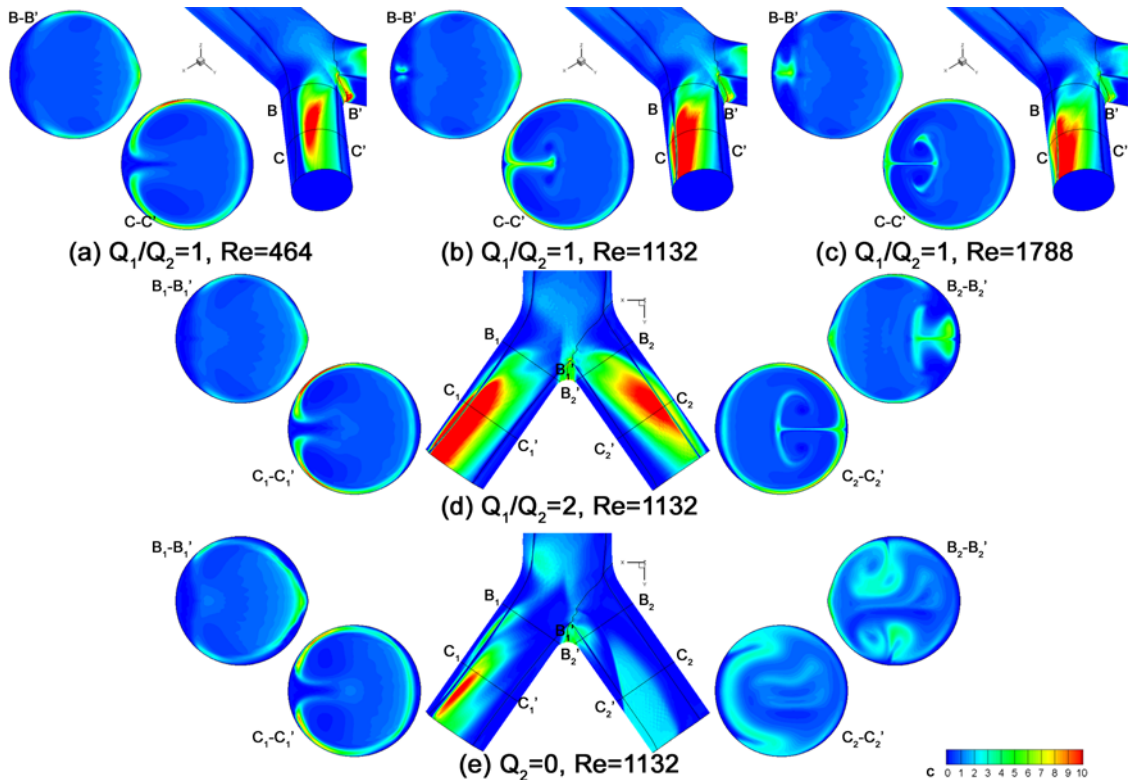


Figure 51: Particle concentration profiles at cross-sections downstream the bifurcation and particle deposition sites on the PRB wall for high Stokes number, $St = 0.1$; (a) $Q_1/Q_2 = 1$, $Re = 464$, (b) $Q_1/Q_2 = 1$, $Re = 1132$, (c) $Q_1/Q_2 = 1$, $Re = 1788$, (d) $Q_1/Q_2 = 2$, $Re = 1132$, and (e) $Q_2 = 0$, $Re = 1132$.

5.3 CONCLUSIONS

In Chapter 5, a computational study of particle transport and deposition in a physiologically realistic bifurcation corresponding to generations three and four (G_3 - G_4) of the human lung is conducted using the developed fully Eulerian model. In particular, the effect of particle size and fluid flow Reynolds number and symmetry, is investigated. It is found that total particle deposition fraction is loosely dependent on fluid flow Reynolds number and our results are in agreement with experimental findings (Kim et al., 1994). Total deposition fraction, also, does not change significantly between symmetric $Q_1/Q_2 = 1$ and asymmetric $Q_1/Q_2 = 2$ flow conditions, but is considerably lower for the totally obstructed case, $Q_2 = 0$. Even though deposition fraction does not vary much for the various flow conditions, deposition sites and particle concentration profiles depend on them. Apart from deposition at the bifurcation, which is present at all cases, deposition sites downstream the bifurcation move towards the outer PRB wall and daughter tube exit as Reynolds number increases. For the $Q_2 = 0$, it is also shown that particles are trapped and deposit even in the obstructed daughter tube. In all studied cases, it is found that there is a particle-free region at the outer wall, at the beginning of the daughter tubes opposite the bifurcation. Overall, the use of the present Eulerian model to obtain not only of the deposition fraction, but also the characteristics of particle deposition and concentration patterns, can offer useful physical insight under different aerosol flow conditions, in a straightforward and simple manner.

In the last decade with the great advances in nanotechnology, there is an increasing scientific interest for the use of magnetic nanoparticles (MNPs) in a wide range of biomedical applications, because they demonstrate many favorable characteristics. MNPs can bind to drugs, proteins, enzymes, antibodies and nucleotides and then directed by external force fields to an organ or tissue or heated by an alternating magnetic field for use in hyperthermia treatments (Gupta and Gupta, 2005). Among the various proposed biomedical uses of MNPs, there are applications related to cancer diagnosis and therapy (Cengelli et al., 2010; Grimm and Scheinberg, 2011; Grobmyer et al., 2011; Prijic and Sersa, 2011; Yallapu et al., 2011), stem cell therapy (Iancu et al., 2009), advanced drug delivery systems (Duran et al., 2008; Kumar et al., 2010; Neuberger et al., 2005) and medical imaging (Lanza et al., 2004; Nahrendorf et al., 2008; Sharma et al., 2006; Sharma and Kwon, 2007; Slevin et al., 2010; Thorek et al., 2006).

The majority of these studies refer to MNPs suspended in the blood, rather in air. Therefore, in this Chapter, the developed Eulerian model is used to predict the transport and deposition of particles suspended in a liquid medium under the influence of an external magnetic force field. As the effect on the particles is due to the non-zero gradient (inhomogeneity) of the magnetic field, the corresponding deposition mechanism is a phoretic phenomenon, which is called magnetophoresis (in analogy to thermophoresis).

6.1 BASIC CONCEPTS OF MAGNETIC FIELDS & MATERIALS

The movement of an electric charge, a time varying electric field, even the movement of electrons in a material can all produce a magnetic field. The magnetic field is a vector field, i.e. it is defined in space by both direction and magnitude, and is characterized by the quantity \vec{H} which is called magnetic field strength and has units of [A/m]. Every material will respond to the presence of a magnetic field \vec{H} , and this response is described by the magnetic induction (or magnetic flux density) \vec{B} [T]. The magnetic induction is an inherent property of a material and defines how strong a magnetic field will be within the material.

The applied magnetic field, \vec{H} , and the magnetic induction of a material, \vec{B} , are related by equation:

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad , \quad (6.1)$$

where μ [Tm/A] is the permeability of the material, which constitutes a measure of the enhancement of the magnetic field inside the material and depends on the magnetic properties of the material. The permeability of the free space, μ_0 , is constant and equals $4\pi \times 10^{-7}$ Tm/A, i.e. in free space \vec{B} is a linear function of the \vec{H} . However, μ may be a function of the applied magnetic field, that is $\mu = f(\vec{H})$, as for example in ferromagnetic materials.

The response of a material to an applied magnetic field, as well as the change of the field due to the presence of the material are given by magnetization \vec{M} , given in [A/m].

Magnetization describes the density of magnetic dipole moments (permanent or induced) inside a magnetic material, and is defined as:

$$\vec{M} = \frac{\vec{m}}{V} \quad , \quad (6.2)$$

where \vec{m} is the total magnetic moment and V the volume of the magnetic material.

In a linear material, the magnetic induction \vec{B} and magnetization \vec{M} are related to the applied magnetic field \vec{H} by equation:

$$\vec{B} = \mu_0 \left(\vec{H} + \vec{M} \right) \quad , \quad (6.3)$$

which holds for all magnetic systems.

Moreover, the relationship between the magnetic field \vec{H} and magnetization \vec{M} is:

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad , \quad (6.4)$$

where the coefficient χ is a dimensionless quantity, called (volume) magnetic susceptibility of the material. Susceptibility expresses how easily a material responds to an external magnetic field. As every material can be considered to have magnetic properties depending on its atomic structure and temperature, Eq.(6.4) can be used to categorize materials in terms of χ (Pankhurst et al., 2003).

The majority of materials display little magnetism under the influence of an external magnetic field. These materials have usually constant χ (linear $\vec{M} - \vec{H}$ relation) and can be either paramagnets, for which χ ranges from 10^{-6} to 10^{-1} , or diamagnets, for which χ ranges from -10^{-6} to -10^{-3} . The former are slightly attracted by a magnetic field, whereas the latter are slightly repelled. However, the materials in both categories lose their magnetic characteristics, when the external field is removed.

On the other hand, there are some materials that demonstrate ordered magnetic states even in the absence of an external field. These materials are classified as ferro-, ferri- or antiferro- magnets, depending on the coupling interaction between the material electrons. The susceptibility of ordered materials is a function not only of the temperature but also of \vec{H} , which results in their characteristic sigmoidal $M - H$ curve. In this case, the magnetization \vec{M} tends to a constant value, called saturation magnetization \vec{M}_{sat} , as the magnetic field strength \vec{H} increases. In addition, in ferro- and ferrimagnetic materials the magnetization process is irreversible, which is depicted as hysteresis loops in their $M - H$ curve as the field strength decreases (Fig.52). The magnetization that remains in a material after the field \vec{H} is removed, is called residual magnetization M_r , and the (reverse) magnetic field strength needed to fully demagnetize the material is called coercive field H_c .

Hysteresis is a phenomenon partly dependent on the size of the magnetic material; particles larger than $1\mu\text{m}$ display narrower loops than smaller particles. However, when the particle size is smaller than $3 - 50\text{nm}$ (depending on the material), the $M - H$ curves are still sigmoidal but there is no hysteresis (anhysteretic curves). These materials are called superparamagnetic and can be magnetized by an external magnetic field similarly to a paramagnet, though their magnetic susceptibility is much larger, whereas they are fully demagnetized in the absence of a field.

The susceptibility of a material, χ , can also be related to its permeability, μ . If the relative permeability is defined as $\mu_r = \mu/\mu_0$, i.e. the ratio of the permeability of the

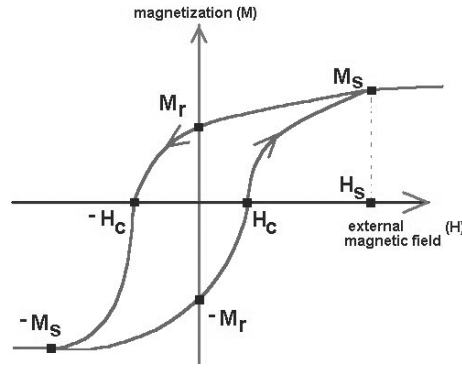


Figure 52: Indicative $M - H$ hysteresis loop.

material to the permeability of free space, then the susceptibility and permeability of a material are related by equation:

$$\mu_r = 1 + \chi \Rightarrow \mu = \mu_o (1 + \chi) \quad . \quad (6.5)$$

The susceptibility of free space, and in practice also of air, is defined equal to zero ($\chi = 0$), thus $\mu_r = 1$. In paramagnetic materials, as already mentioned, susceptibility is positive but small, so μ_r is slightly larger than unity and in diamagnetic materials χ is small and negative, thus μ_r is slightly less than unity. Ferro- and ferrimagnetic materials have large and positive χ and μ_r .

The previous theoretical description of the basic concepts of magnetic fields and materials is based on the studies of [Pankhurst et al. \(2003\)](#); [Hatch and Stelter \(2001\)](#); [Zborowski et al. \(1999\)](#).

6.2 MAGNETIC FORCE ON PARTICLES

The magnetic force on a small particle can be assumed to equal the force exerted on a point-like magnetic dipole moment \vec{m} ([Hallmark et al., 2010](#)), and is given by:

$$\vec{F}_m = (\vec{m} \cdot \nabla) \vec{B} \quad , \quad (6.6)$$

which states that the magnetic force \vec{F}_m results from the differentiation of the magnetic induction \vec{B} in the direction of the magnetic moment \vec{m} . It should be emphasized that a non-uniform magnetic induction field is needed in order for the magnetic force on a particle to become non-zero.

Assuming that the particle is magnetized uniformly over its entire volume V_p and that the carrying fluid is an isotropic and weakly diamagnetic material, such as water or air, for which it holds that $\mu_f \approx \mu_o$, then using Eqs.(6.1-6.4), Eq.(6.6) becomes:

$$\vec{F}_m = \frac{V_p \chi}{\mu_o} (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{B} \quad . \quad (6.7)$$

If the magnetic field is static and there are no currents in the fluid, then Maxwell equation gives $\nabla \times \vec{B} = 0$. Making use of this result and the mathematical identity:

$$\nabla (\vec{B} \cdot \vec{B}) = 2 \left[\vec{B} \times (\nabla \times \vec{B}) + (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{B} \right] \quad , \quad (6.8)$$

it follows that $(\vec{B} \cdot \nabla) \vec{B} = \frac{1}{2} \vec{B} \cdot \vec{B} = \frac{1}{2} B^2$, where $B = |\vec{B}|$. Thus, Eq.(6.7) becomes:

$$\vec{F}_m = V_p \chi \nabla \left(\frac{B^2}{2\mu_o} \right) , \quad (6.9)$$

or making use of Eq.(6.1):

$$\vec{F}_m = V_p \chi \nabla \left(\frac{\mu_o H^2}{2} \right) . \quad (6.10)$$

Equivalently,

$$\vec{F}_m = V_p \chi \nabla \left(\frac{1}{2} \vec{B} \cdot \vec{H} \right) , \quad (6.11)$$

where the term $\frac{1}{2} \vec{B} \cdot \vec{H}$ is the energy density of the (magnetostatic) field (Pankhurst et al., 2003; Zborowski et al., 1999).

The magnetic susceptibility in the equations above, can be itself a function of the magnetic field, i.e. $\chi = f(\vec{H})$. Therefore, \vec{F}_m is, in general, a complicated spatial function of the various implicated quantities (Zborowski et al., 1999). In order to deal with the problem, some simplifying assumptions can be made depending on each particular application.

6.2.1 Linear Magnetization Model

Furlani and Ng (2006); Furlani (2007) derived the expression of the magnetic force \vec{F}_m on a particle using a linear magnetization model with saturation and the 'effective' dipole moment method of Jones (1995), assuming dilute particle suspension, i.e. negligible inter-particle effects and particle-fluid interactions (one-way coupling). Their findings are summarized next.

The 'effective' dipole moment method states that the magnetized particle can be replaced by a point-like dipole with a magnetic moment $\vec{m}_{p,eff}$. Thus, the force on the particle equals:

$$\vec{F}_m = \mu_f (\vec{m}_{p,eff} \cdot \nabla) \vec{H} , \quad (6.12)$$

where \vec{H} the applied external magnetic field. The 'effective' point dipole should be such that, when positioned to the center of the particle, it will produce the same magnetic field distribution outside the particle as the particle itself.

Assuming uniform magnetization over the volume of the particle, $\vec{m}_{p,eff} = V_p \vec{M}_p$, and a weakly diamagnetic fluid, $\mu_f \approx \mu_o$, Eq.(6.12) becomes:

$$\vec{F}_m = \mu_o V_p (\vec{M}_p \cdot \nabla) \vec{H} . \quad (6.13)$$

An expression for the particle magnetic response is needed in Eq.(6.13) to calculate the magnetic force. In this case the linear magnetization model is implemented. Below saturation of the particle, its magnetization equals:

$$\vec{M}_p = \chi_p \vec{H}_{in} , \quad (6.14)$$

where $\chi_p = \mu_p / (\mu_o - 1)$ and \vec{H}_{in} the field inside the particle. The latter is different from the applied external field \vec{H} due to the demagnetization field \vec{H}_{dm} caused by the particle

itself. It holds that $\vec{H}_{in} = \vec{H} - \vec{H}_{dm}$, whereas for a sphere in free space with uniform magnetization the demagnetization field equals $\vec{H}_{dm} = \vec{M}_p/3$.

On the other hand, above saturation, i.e. if $|H_{in}| \geq |M_{p,sat}/\chi_p|$, the magnetization of particle is constant and equal to the magnetization saturation of the particle:

$$\vec{M}_p = \vec{M}_{p,sat} \quad . \quad (6.15)$$

Overall, [Furlani and Ng \(2006\)](#) showed that below saturation the magnetization of the particle is given by:

$$\vec{M}_p = \frac{3\chi_p (\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3(\chi_f + 1)} \vec{H} \quad , \quad (6.16)$$

and the magnetic field inside the particle equals:

$$\vec{H}_{in} = \frac{3(\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3(\chi_f + 1)} \vec{H} \quad , \quad (6.17)$$

Moreover, the 'effective' magnetic moment is described by:

$$\vec{m}_{p,eff} = V_p f(H) \vec{H} \quad , \quad (6.18)$$

where the function $f(H)$ equals:

$$f(H) = \begin{cases} \frac{3(\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3(\chi_f + 1)} & , H < \frac{3(\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3(\chi_f + 1)} \chi_p - \chi_f M_{p,sat} \\ \frac{M_{p,sat}}{H} & , H \geq \frac{3(\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3(\chi_f + 1)} \chi_p - \chi_f M_{p,sat} \end{cases} \quad . \quad (6.19)$$

The first case corresponds to an under-saturated particle, whereas the second to a saturated. Equation (6.19) is simplified when $|\chi_p| \ll 1$:

$$f(H) = \begin{cases} \frac{3(\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3} & , H < \frac{3(\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3} \chi_p - \chi_f M_{p,sat} \\ \frac{M_{p,sat}}{H} & , H \geq \frac{3(\chi_p - \chi_f)}{(\chi_p - \chi_f) + 3} \chi_p - \chi_f M_{p,sat} \end{cases} \quad , \quad (6.20)$$

or when $|\chi_p| \gg 1$:

$$f(H) = \begin{cases} 3 & , H < M_{p,sat}/3 \\ \frac{M_{p,sat}}{H} & , H \geq M_{p,sat}/3 \end{cases} \quad . \quad (6.21)$$

Finally, when $|\chi_p - \chi_f| \ll 1$, then for the under-saturated case ([Furlani, 2007](#)):

$$f(H) = \chi_p - \chi_f \quad . \quad (6.22)$$

Overall, substitution of Eq.(6.18) in Eq.(6.12) gives the magnetic force on a particle assuming linear response to the external magnetic field:

$$\vec{F}_m = \mu_o V_p f(H) \left(\vec{H} \cdot \nabla \right) \vec{H} \quad , \quad (6.23)$$

which for a magnetostatic field without current, is simplified to:

$$\vec{F}_m = \mu_o V_p f(H) \nabla \left(\frac{\vec{H}^2}{2} \right) \quad , \quad (6.24)$$

where $f(H)$ is given by Eq.(6.19) or, alternatively, by one of the Eqs.(6.20-6.22) depending on the specific application.

The dependence of coefficient f on H , is somehow misleading in the content of particle magnetization linear approach. The value of the function $f(H)$ changes only between under-saturated and saturated state of the particle and in each case stays constant, giving this way the linear relationship between particle magnetization and the external magnetic field.

6.2.2 Superparamagnetic Particles - Langevin Function

In many biomedical applications, the magnetic particles material is composite, where the actual magnetic component is dispersed in a polymeric matrix (Figuerola et al., 2010; Lu et al., 2007; Cengelli et al., 2010; Thorek et al., 2006; Neuberger et al., 2005). The magnetic component consists of spherical particles with diameters in the range of nanometers, which typically results in superparamagnetic behavior under an applied external magnetic field. As a result, the magnetic moment of the particles does not align with the external magnetic field, because of their thermal agitation.

The average magnetization of the magnetic nanoparticles, $M_{fm,p}$, in the direction of the magnetic field \vec{H} is given by (Chen et al., 2007b; Bockenfeld et al., 2010):

$$M_{fm,p} = M_{fm,s} L(\alpha) \quad , \quad (6.25)$$

where $L(\alpha)$ is the Langevin function:

$$L(\alpha) = \coth(\alpha) - \frac{1}{\alpha} \quad . \quad (6.26)$$

The argument α in Langevin function, called Langevin argument, equals:

$$\alpha = \frac{\mu_0 M_{fm,s} V_{sdp} (H - \frac{1}{3} \omega_{fm,p} M_{fm,p})}{k_B T} \quad , \quad (6.27)$$

where $M_{fm,s}$ is the saturation magnetization of the magnetic nanoparticles inside the composite particle, V_{sdp} is the volume of a single nanoparticle, k_B is the Boltzman constant and T the absolute temperature.

In the previous equations, $\omega_{fm,p}$ is the volumetric fraction of magnetic nanoparticles in the composite particle that is related to the weight fraction $\chi_{fm,p}$ through:

$$\omega_{fm,p} = \frac{\chi_{fm,p}}{\chi_{fm,p} + (1 - \chi_{fm,p}) \rho_{fm,p} / \rho_{pol,p}} \quad , \quad (6.28)$$

with $\rho_{fm,p}$ and $\rho_{pol,p}$ the densities of the magnetic and the polymeric materials in the particle, respectively. When the volume fraction $\omega_{fm,p}$ is small, the term $1/3 \omega_{fm,p} M_{fm,p}$ in Eq.(6.27), which represents the demagnetization of the whole composite particle, can be neglected. Thus, Eq.(6.25) becomes:

$$M_{fm,p} = M_{fm,s} \left[\coth \left(\frac{\mu_0 M_{fm,s} V_{sdp} H}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{\mu_0 M_{fm,s} V_{sdp} H} \right] \quad . \quad (6.29)$$

The (total) magnetic moment \vec{m}_p of the composite particle, will be (Cregg et al., 2012):

$$\vec{m}_p = \omega_{f_{m,p}} V_p \frac{M_{f_{m,p}}}{H} \vec{H} \quad . \quad (6.30)$$

Substitution into Eq.(6.6), taking also into account that $\vec{B} = \mu_o \vec{H}$, gives the following expression for the magnetic force on the particle:

$$\vec{F}_m = \mu_o \omega_{f_{m,p}} V_p \frac{M_{f_{m,p}}}{H} \nabla \left(\frac{H^2}{2} \right) \quad . \quad (6.31)$$

6.2.3 Generalization

Comparison of Eq.(6.24) for the linear magnetization model to Eq.(6.31) for the superparamagnetic particles, shows that the different approaches for the particle magnetization can be described by Eq.(6.10) with a proper expression for the susceptibility χ .

In the case of linear particle magnetization the susceptibility:

$$\chi_{lm} = f(H) \quad , \quad (6.32)$$

is related only to the particle and fluid properties and is independent of the external magnetic field \vec{H} . Its value changes only with respect to the particle being under- or oversaturated, with $f(H)$ given by Eq.(6.19).

On the other hand, in the case of superparamagnetic particles, susceptibility is a function of the externally applied magnetic field and equals:

$$\chi_{spm}(H) = \omega_{f_{m,p}} \frac{M_{f_{m,p}}}{H} \quad . \quad (6.33)$$

6.3 MAGNETIC FIELDS

6.3.1 Magnetic Field of an Infinitely Long Straight Wire Carrying a Current I

At a point P, which is at a distance h from the wire, the magnitude of the field is equal to:

$$\vec{H} = (I/2\pi h) \hat{n}_B \quad . \quad (6.34)$$

Consequently, the magnetic field density would be:

$$\vec{B} = \mu_o \vec{H} \Rightarrow \vec{B} = \mu_o (I/2\pi h) \hat{n}_B \quad , \quad (6.35)$$

where $\mu_o = 4\pi 10^7$ T m/A the magnetic permeability of free space and \hat{n}_B is the unit vector in the direction of the magnetic field. In particular, if \hat{n}_w and \hat{n}_h are the unit vectors at the direction of the wire and the distance h , respectively, then \hat{n}_B is defined as:

$$\hat{n}_B = \hat{n}_w \times \hat{n}_h \quad . \quad (6.36)$$

6.3.2 Magnetic Field of a Circular Line Current

The magnetic field of a cylindrical superconducting magnet with diameter 2α and thickness h , resembles that of a circular line current. For a loop of radius α , carrying a current I , with $H_o \equiv I/2\alpha$, the magnetic field is given by (Haverkort et al., 2009a):

$$\vec{H}(z', s') = \frac{H_o}{\pi\sqrt{(1+s')^2 + z'^2}} \left[K(k) (\hat{z} - \hat{s}) + E(k) \frac{1-s'^2 - z'^2}{(1+s')^2 + z'^2 - 4s'} (\hat{z} + \hat{s}) \right] , \quad (6.37)$$

where $K(k)$ and $E(k)$ are elliptic integrals of the first and second kind, respectively, with k given by:

$$k = \sqrt{\frac{4s'}{(1+s')^2 + z'^2}} . \quad (6.38)$$

The cylindrical coordinates z and s represent the distance parallel and perpendicular to the symmetry axis, respectively, whereas the prime denotes nondimensionalization with the loop radius α , i.e. $z' \equiv z/\alpha$ and $s' \equiv s/\alpha$, and the \hat{z} , \hat{s} denote the unit vector in the direction of z and s , respectively (Fig.53).

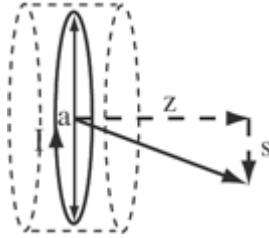


Figure 53: Circular current carrying loop (adapted from Haverkort et al. (2009a)).

6.3.3 Magnetic Field of FM Wires in a Uniform External Magnetic Field

Based on the work of Murariu et al. (2001), the relationships that describe the magnetic field produced by one and two ferromagnetic (FM) wires, which are magnetized by a uniform external magnetic field \vec{H}_o , are derived in Cartesian coordinates.

One Wire

The magnetic field generated around a ferromagnetic (FM) wire placed in a uniform magnetic field of intensity \vec{H}_o is in polar coordinates (r, θ) (Fig.54):

$$\vec{H} = \cos\theta \left(H_o + \frac{M_w r_w^2}{2 r^2} \right) \hat{r} + \sin\theta \left(-H_o + \frac{M_w r_w^2}{2 r^2} \right) \hat{\theta} , \quad (6.39)$$

where M_w is the magnetization and r_w the radius of the wire. Equation (6.39) is made dimensionless dividing by H_o :

$$\begin{aligned} h_r &= \cos\theta \left(1 + K_w \frac{r_w^2}{r^2} \right) \hat{r} \\ h_\theta &= \sin\theta \left(-1 + K_w \frac{r_w^2}{r^2} \right) \hat{\theta} \end{aligned} \quad (6.40)$$

where h_r and h_θ are the radial and angular components of the dimensionless magnetic field $\vec{h} = \vec{H}/H_o$, respectively. The demagnetization factor, K_w , is a dimensionless constant dependent on the magnetic properties of the FM wire and the external magnetic field. It is $K_w = M_w/2H_o$ at saturation of the wire and $K_w = 1$ when the wire is undersaturated (Hournkumnuard and Chantrapornchai, 2011; Rotariu et al., 2005b).

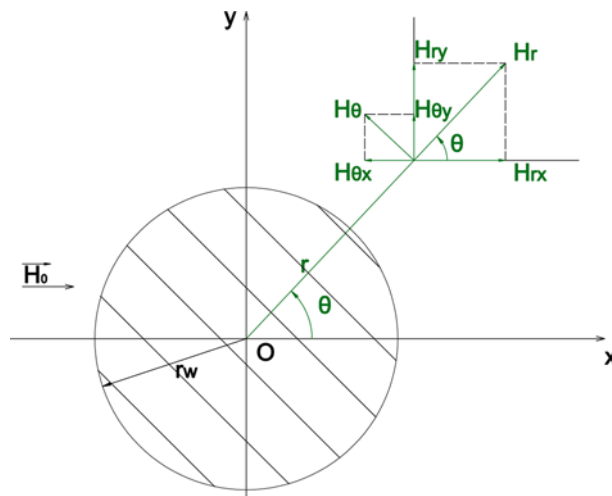


Figure 54: Geometry and systems of coordinates for 1 FM wire.

In Cartesian coordinates the (dimensionless) magnetic field is written as:

$$\begin{aligned} h_x &= 1 + K_w r_w^2 \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2} \hat{i} \\ h_y &= K_w r_w^2 \frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2} \hat{j} \end{aligned} \quad (6.41)$$

Derivation of Eq.(6.41) is shown in APPENDIX A.

Two Wires

The (dimensionless) magnetic field generated by two FM wires placed in a uniform magnetic field of intensity \vec{H}_o can be found by the sum of the magnetic intensities generated by each FM wire. In polar coordinates (r, θ) one gets (Figs.55-56):

$$\begin{aligned} h_r &= \cos\theta + K_w r_w^2 \left[\frac{\cos(2\theta_1 - \theta)}{r_1^2} + \frac{\cos(2\theta_2 - \theta)}{r_2^2} \right] \hat{r} \\ h_\theta &= \sin\theta + K_w r_w^2 \left[\frac{\sin(2\theta_1 - \theta)}{r_1^2} + \frac{\sin(2\theta_2 - \theta)}{r_2^2} \right] \hat{\theta} \end{aligned} \quad (6.42)$$

In Cartesian coordinates the (dimensionless) magnetic field is written as:

$$\begin{aligned} h_x &= 1 + K_w r_w^2 \left[\frac{x^2 - (y + \ell)^2}{(x^2 + (y + \ell)^2)^2} + \frac{x^2 - (y - \ell)^2}{(x^2 + (y - \ell)^2)^2} \right] \hat{i} \\ h_y &= K_w r_w^2 \left[\frac{2x(y + \ell)}{(x^2 + (y + \ell)^2)^2} + \frac{2x(y - \ell)}{(x^2 + (y - \ell)^2)^2} \right] \hat{j} \end{aligned} \quad (6.43)$$

Derivation of Eq.(6.43) is shown in APPENDIX A.

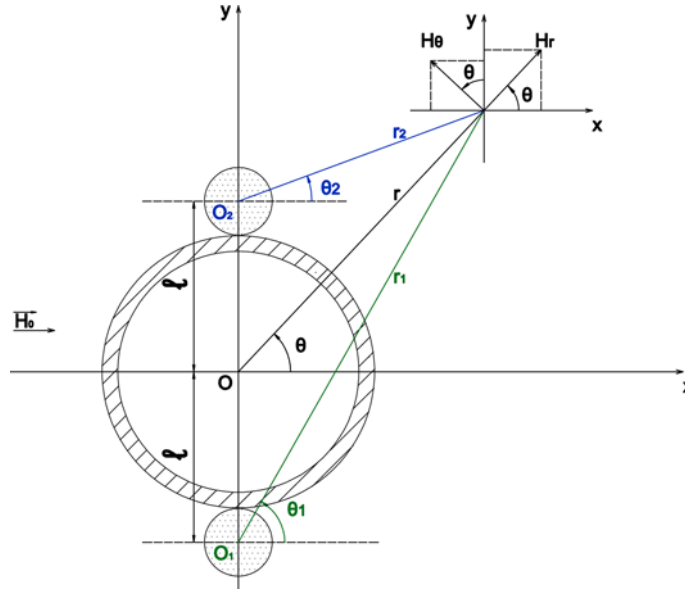


Figure 55: Geometry and systems of coordinates for 2 FM wires.

6.4 PARTICLE MAGNETIC VELOCITY

The magnetic force, \vec{F}_m , results in particle movement with a 'magnetic' velocity equal to:

$$\vec{u}_m = \tau_p \vec{F}_m \quad , \quad (6.44)$$

according to Eq.(2.37).

Assuming that the particle is spherical, with diameter d_p , and uniformly magnetized over its entire volume, $V_p = \pi d_p^3/6$, as well as that the carrying fluid is an isotropic and weakly diamagnetic material, such as water or air, and there are no currents in the fluid, then Eqs.(6.9) and (6.10) apply for \vec{F}_m and Eq.(6.44) becomes:

$$\vec{u}_m = \frac{d_p^2 \chi}{18 \mu_f} \nabla \left(\frac{B^2}{2 \mu_o} \right) \quad , \quad (6.45)$$

or equivalently,

$$\vec{u}_m = \frac{d_p^2 \chi}{18 \mu_f} \nabla \left(\frac{\mu_o H^2}{2} \right) \quad . \quad (6.46)$$

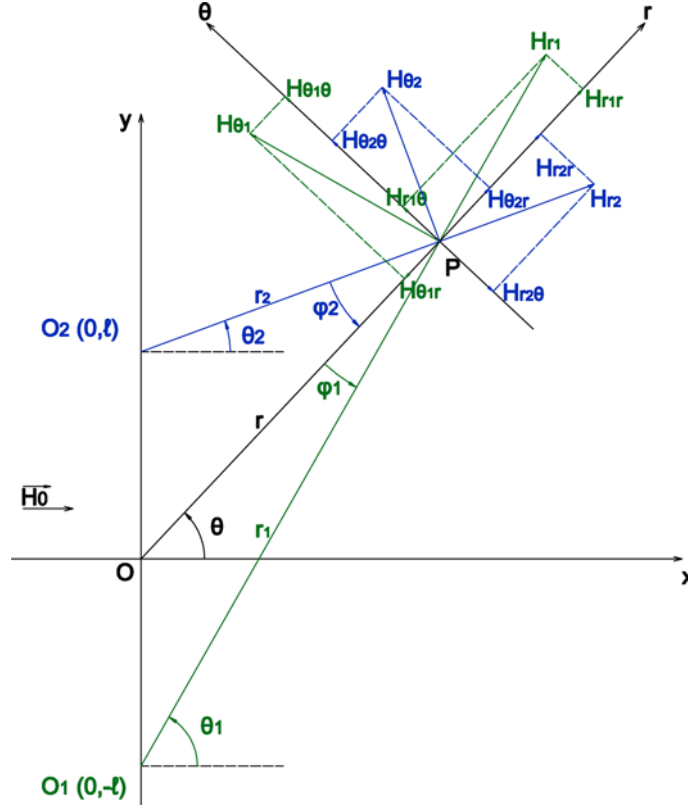


Figure 56: Details of systems of coordinates for 2 FM wires and components of the \vec{H} .

The magnetophoretic mobility of the particle, ξ_p [$\text{m}^3\text{s}/\text{kg}$], is defined as (Pankhurst et al., 2003; Zborowski et al., 2002):

$$\xi_p \equiv \frac{\chi d_p^2}{18\mu_f} . \quad (6.47)$$

The magnetophoretic mobility depends on the field in exactly the same way as the magnetic susceptibility does. For the linear magnetization model, it holds that:

$$\xi_{p,lm} = \frac{d_p^2}{18\mu_f} f(H) , \quad (6.48)$$

whereas for superparamagnetic particles:

$$\xi_{p,spm}(H) = \frac{d_p^2}{18\mu_f} \omega_{fm,p} \frac{M_{fm,p}}{H} . \quad (6.49)$$

Finally, the 'magnetic' velocity of the particle (Eq.(6.46)) is written as:

$$\vec{u}_m = \xi_p \nabla \left(\frac{\mu_0 H^2}{2} \right) . \quad (6.50)$$

Characteristic Quantities of the Problem	
length	tube diameter, d_t
velocity	mean inlet fluid velocity, v_o
acceleration of gravity	$g_o = 9.81\text{m/s}^2$
magnetic field	H_o
concentration	mean inlet concentration, c_o

Table 6: Characteristic quantities of the problem used to render dimensionless particle transport equation

6.5 PARTICLES PTE IN MAGNETOPHORESIS

Taking into account the effects of particle, convection, inertia, gravitational settling, magnetophoresis and diffusion, then the particle velocity (Eq.(2.60)) equals:

$$\vec{v}_p = \vec{v} + \vec{v}_s + \vec{u}_m - D\nabla \ln c - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} + O(\tau_p^2) \quad , \quad (6.51)$$

where the 'magnetic' velocity is given by Eq.(6.50).

If Eq.(6.51) is incorporated into the dimensionless form of the PTE (Eq.(2.73)), then we obtain:

$$\int_S c \left\{ \vec{v} + \text{St} \left[\text{Fr}^{-1} \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \hat{g} - 0.5\vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right] + 0.5Mn_p \nabla \left(\frac{H^2}{2} \right) \right\} \cdot d\vec{S} = 0.5\text{Pe}^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\vec{S} \quad . \quad (6.52)$$

Equation (6.52) incorporates the effects of particle convection, inertia, gravitational settling, magnetophoresis and diffusion in an Eulerian formalism to first order in the particle relaxation time.

The characteristic quantities used to render dimensionless Eq.(6.52), are shown in Table 6. In Eq.(6.52), the following dimensionless numbers appear; the Stokes number $\text{St} = \tau_p v_o / r_t$, the Peclet number $\text{Pe} = r_t v_o / D$ and the Froude number $\text{Fr} = v_o^2 / (r_t g_o)$. In addition, a new dimensionless number related to the external magnetic field appears, which is the particle magnetization number, given by:

$$Mn_p = \frac{\mu_o \xi_p H_o^2}{v_o r_t} \quad . \quad (6.53)$$

It should be noted that while Stokes, Peclet and Froude numbers depend only on the size of the particles, i.e. d_p , for a given fluid-particles system, the particle magnetization number can also be a spatial function of the applied magnetic field through the magnetophoretic mobility ξ_p .

A few substantial remarks regarding Eq.(6.52) are in order here. As already mentioned, in the present Chapter, the developed Eulerian model is used to predict particle transport and deposition suspended in water, i.e. a liquid, rather than air that was the case in the previous applications (Chapters 4 and 5). One of the main differences between a liquid-particles system and an aerosol is that the assumption of $\rho_f \ll \rho_p$ may no longer be true. Therefore, Eq.(2.34) is used in the PBE, instead of the simplified Eq.(2.35), to describe gravitational settling. Moreover, as liquids are always continuous media the Cunningham correction factor is always equal to unity (more strictly, C_c is not used in

liquid-particles systems). Finally, as the viscosity of water is two orders of magnitude higher than the viscosity of air, $\mu_{\text{water}} = 0.001 \text{ kg/m s}$ and $\mu_{\text{air}} = 1.81 \times 10^{-5} \text{ kg/m s}$ respectively, the particle relaxation time, or Stokes number, will be significantly lower, in water and, thus, inertial effects of particles weaker.

6.6 SIMULATIONS & RESULTS

As the role of magnetic micro- and nano- particles in medicine became more important over the years, mathematical and computational modelling of particles magnetophoresis for applications of biological interest became important, as well. This field is very active for more than one decade and the complexity of the modeled systems increases constantly.

Most of the works are focused on simple flow geometries and study the effect of the origin of the magnetic field and its characteristics to particle capture. For example, Furlani and coworkers have studied numerically in Lagrangian formulation the magnetophoresis of particles in a tube of circular cross-section with laminar flow, where the magnetic field was created by an infinite cylindrical magnet, magnetized perpendicular to its axis (Furlani and Ng, 2006; Furlani and Furlani, 2007), whereas in an another set of studies they examined a bioseparator that consisted of an array of conductive elements embedded beneath a rectangular microfluidic channel (Furlani, 2006, 2007; Furlani et al., 2007). Moreover, Rotariu and coworkers focused on the magnetic separation of particles that carry microorganisms and examined both experimentally and numerically their flow in cylindrical tubes under the influence of the magnetic field created by either one or two ferromagnetic wires in a homogeneous external magnetic field (Rezlescu et al., 1995; Murariu et al., 2001; Rotariu et al., 2005a). In addition, they work on targeted drug delivery in the microvasculature of tumors and examined the effect of different magnetic fields (Rotariu and Strachan, 2005).

All the aforementioned studies were two-dimensional. Haverkort, Kenjereš and coworkers used both commercial and in-house codes to study, also in Lagrangian description, the three-dimensional flow of magnetic particles. In particular, they examined particle magnetophoresis under steady-state conditions in straight circular tube and 90° bend of circular cross-section, where the magnetic field originated from infinite long current carrying wire or circular current loop, as well as the time varying flow of particles in the left coronary and the carotid arteries when the magnetic field is created by a superconducting cylindrical magnet (Haverkort et al., 2009a,b; Haverkort and Kenjereš, 2009; Kenjereš and Cohen Stuart, 2010; Cohen Stuart et al., 2011).

During the last years, Chen and coworkers (Chen et al., 2007a,b,c,d, 2008a,b,c; Bock-enfeld et al., 2010; Chen et al., 2011) investigate, both experimentally and numerically (commercial software and Lagrangian description), a portable magnetic separator device for human blood detoxification. The device is comprised of parallel tubes, in which the fluid flows, and long cylindrical wires with their axes parallel to the tubes axes. The whole device is under the influence of an external constant magnetic field. This way the wires produce a non-uniform magnetic induction field in the lumen of the tubes. If there are magnetizable particles suspended in the fluid (blood) entering the device, then these particles are affected by the magnetic field. Changing the properties of the wires and, consequently, of the induced magnetic field, as well as the tube geometry, the particles can be totally removed from the flowing fluid.

Fluid & Particle Properties	
Fluid temperature, T	293 K
Fluid density, ρ_f	1000 kg/m ³
Fluid dynamic viscosity, μ_f	3.5×10^{-3} kg/m s
Fluid mean inlet velocity, v_o	0.1 m/s
Tube diameter, d_t	7×10^{-3} m
Particle density, ρ_p	6450 kg/m ³
Particle diameter, d_p	0.25 – 2.5 μ m
Magnetic susceptibility, χ	3
Dean number, $De = Re/\sqrt{R_o}$	84.5

Table 7: Fluid and particle properties used in the comparison with [Haverkort et al. \(2009a\)](#).

From the aforementioned studies, it is obvious that Lagrangian description of the particle population is used in the vast majority of the numerical studies of magnetophoresis. Notable exceptions are the works of [Khashan et al. \(2011a,b\)](#); [Habibi and Ghasemi \(2011\)](#), who studied the flow of magnetic particles under the influence of magnetic fields using fully Eulerian methodology. The studies of Khashan and coworkers ([Khashan et al., 2011a,b](#)) assume Newtonian fluid and two-way coupling (i.e. the fluid flow is affected by the particles), whereas the study of [Habibi and Ghasemi \(2011\)](#) assumes non-Newtonian, ferrofluid. Although these studies are advanced in terms of the physical phenomena involved, they are constricted to two-dimensional flows.

In this work, the developed fully Eulerian model will be used in order to study the three-dimensional transport and deposition of particles suspended in a liquid medium. In particular, the simple geometries and magnetic fields, that can be given analytically, of [Haverkort et al. \(2009a\)](#); [Chen et al. \(2007b, 2008c\)](#) are used for simulations and comparison.

6.6.1 Comparison with [Haverkort et al. \(2009\)](#)

The numerical work of [Haverkort et al. \(2009a\)](#), and more precisely their study of particle magnetophoresis in a a 90° bend of circular cross-section, is used for comparison. The magnetic field comes from either an infinite long current carrying wire or a circular current loop. The properties of the fluid and particles, used in the simulations, are collected in Table 7 and a schematic diagram of the bend geometry used is shown in Fig.57.

In this study, a linear particle magnetization model was used. In particular, the magnetization \vec{M} is given by:

$$\vec{M} = \begin{cases} \chi \vec{H} & , H < M_{sat}/|\chi| \\ (\chi/|\chi|) M_{sat} \hat{H} & , H \geq M_{sat}/|\chi| \end{cases} . \quad (6.54)$$

M_{sat} and χ are the saturation magnetization and the magnetic susceptibility, respectively, and $H = |\vec{H}|$ the magnitude of the magnetic field. The first case of Eq.(6.54) corresponds to under-saturated material, whereas the second to saturated. Assuming that the magnetic field is approximately constant over the volume of a particle and the surrounding fluid

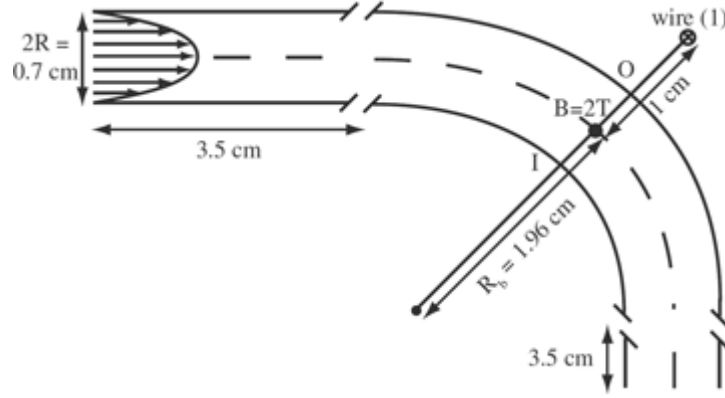


Figure 57: Schematic diagram of the geometry used by Haverkort et al. (2009a). The position 1 (pos1) of the infinitely long current carrying wire is shown here.

has negligible magnetic susceptibility, the magnetic force \vec{F}_m on a spherical particle with diameter d_p is:

$$\vec{F}_m = \begin{cases} \mu_0 \chi \frac{\pi d_p^3}{6} \nabla \left(\frac{H^2}{2} \right) & , H < M_{sat} / |\chi| \\ \mu_0 (\chi / |\chi|) \frac{\pi d_p^3}{6} M_{sat} \hat{H} \cdot \nabla \vec{H} & , H \geq M_{sat} / |\chi| \end{cases} \quad (6.55)$$

Infinite Long Straight Current Carrying Wire

In this case particles are assumed to be under-saturated. The infinitely long current carrying is positioned in four different ways in space, as shown in Fig.58. In this figure the calculated magnetic force density is, also, shown at the bend wall, which is of the same order of magnitude and presents the same patterns as the one presented in Haverkort et al. (2009a).

The predictions of the present study for the different locations of the current carrying wire, in terms of particle deposition fraction, are shown in Fig.59. The results of the Eulerian model compare well against the findings of Haverkort et al. (2009a), with the exception of wire position 2 (the wire is located at the inside of the bend). The differences in this particular case is greater for the smaller particles, but the reason for the discrepancy is not clear.

Circular Current Carrying Line

Simulation are performed using the magnetic field of a circular current loop with radius $\alpha = 1\text{cm}$, carrying a current $I = 3 \times 10^5\text{A}$ and placed at a distance of 1cm from the centerline halfway the bend. Fully saturated particles are assumed with a saturation magnetization of $M_{sat} = 10^6\text{A/m}$. The angle γ between the axis of the current loop and the plane of the bend (Fig.60) is varied from $\gamma = 0^\circ$ (outside of the bend) to $\gamma = 180^\circ$ (inside of the bend). The properties of the fluid and particles are shown in Table 7.

In Fig.61, the deposition fraction of particles is shown versus the position, i.e. angle γ , of the current carrying loop. The agreement of the present work with the numerical study of Haverkort et al. (2009a) is excellent for $1\mu\text{m}$ particles and γ angles from 0° to 135° . However, the Eulerian model predicts lower deposition for the submicron particles regardless the loop position. The differences from the Haverkort et al. (2009a) simulations are greater as the loop moves from the outer side (0°) of the bend to the inner (180°).

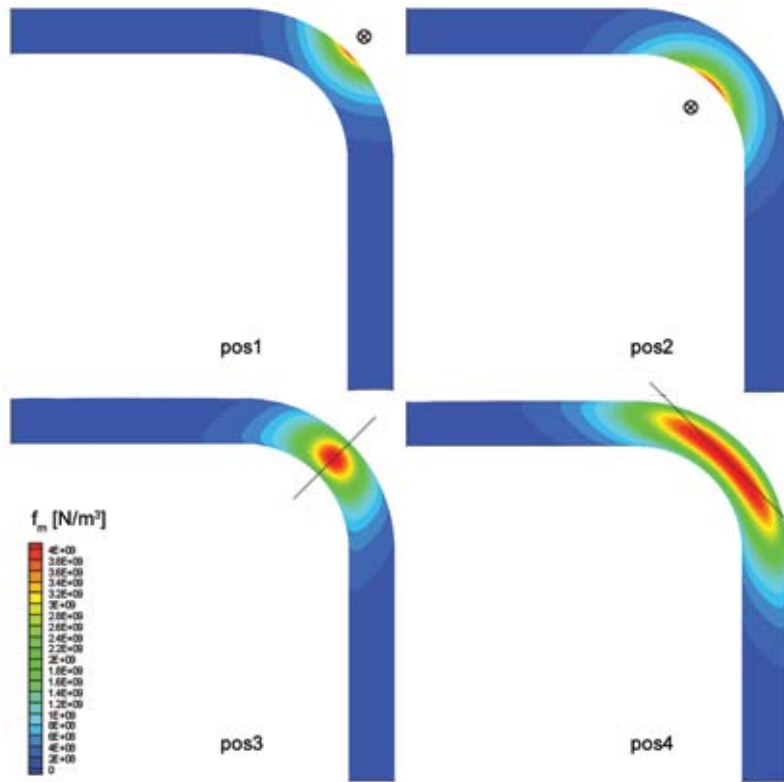


Figure 58: Magnetization force per unit volume, f_m [N/m^3], for different locations of the current carrying wire.

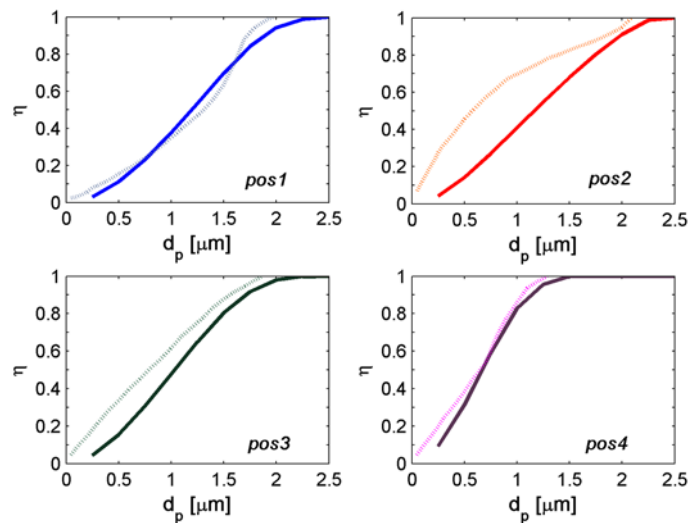


Figure 59: Deposition fraction for different locations of the current carrying wire. The results of the Eulerian model are shown in continuous lines, whereas the results of [Haverkort et al. \(2009a\)](#) in dotted lines.

This is also depicted in Fig. 62, where the deposition fraction for each loop position is given as a function of the particle diameter.

Here, again the basis of these discrepancies, is not clear. One may think that this is a sign of a 'missing' deposition mechanism, especially for particles with $d_p < 1 \mu\text{m}$, which should be included into the particle population balance equation.

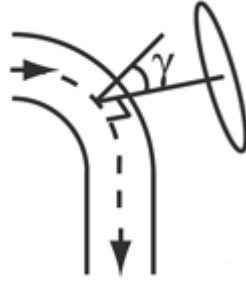


Figure 60: Loop position around the bend. Definition of angle γ (adapted from Haverkort et al. (2009a)).

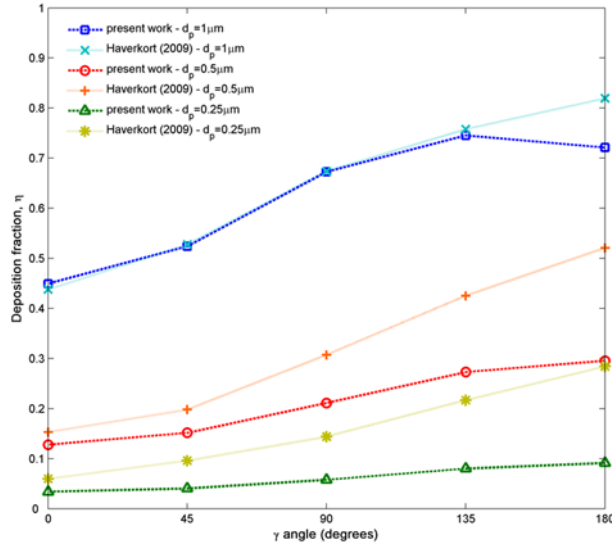


Figure 61: Deposition fraction as a function of the current carrying loop location (γ angle). The results of the present work (Eulerian model) are shown in dashed lines, whereas the results of Haverkort et al. (2009a) in dotted lines.

6.6.2 Comparison with Chen et al. (2007, 2008a,b)

In this section, the developed Eulerian model is used in order to predict magnetic particle transport and deposition in a straight circular tube under the influence of the magnetic field produced by two ferromagnetic wires in an external homogeneous magnetic field.

This configuration, shown in Fig.63, is in essence a 'building block' of the device proposed by Chen and coworkers, that they have studied both experimentally and numerically (Chen et al., 2007b,c, 2008b,c). For all simulations, fully developed fluid velocity profile at the inlet of the tube is assumed. The properties of the fluid and particles are summarized in Table 8, and the properties of the wires and external magnetic field are given in Table 9.

As shown in Table 8, the magnetic spheres in the study is a composite material, where the magnetic particles are spherical with diameter of $d_{\text{fm},p} = 10\text{nm}$. These particle demonstrate superparamagnetic behavior under the influence of the induced magnetic field, and their magnetization is expressed through the Langevin function (Eq.(6.26)).

In Fig.64(a) the (dimensionless) magnetic field, magnitude (contour) and streamlines, for the base case properties is shown at a cross section of the tube. It should be noted that there is no component of the magnetic field in the axial direction of the tube, because

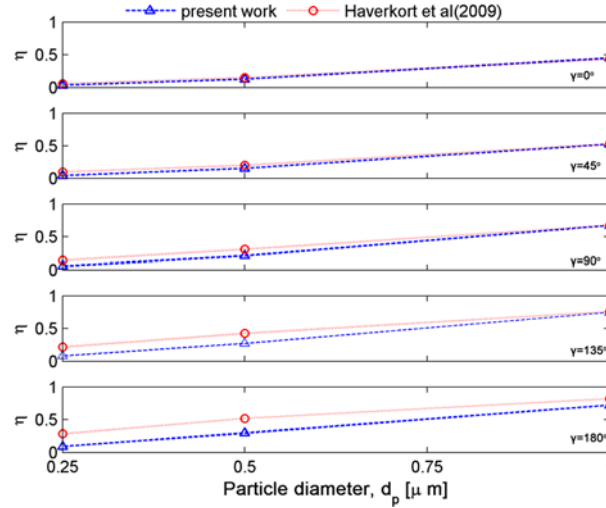


Figure 62: Deposition fraction as a function of the particle diameter at different locations of the current carrying loop.

Properties for Chen et al. Comparison - A	
Fluid temperature, T	298.15 K
Fluid density, ρ_f	1000 kg/m ³
Fluid dynamic viscosity, μ_f	1.0×10^{-3} kg/m s
Fluid mean inlet velocity, v_o	0.14 – 45.0, <u>5.0</u> m/s
Tube inner diameter, d_{tin}	0.75×10^{-3} m
Tube outer diameter, d_{tout}	1.0×10^{-3} m
Sphere diameter, d_p	1.7 μ m
Sphere magnetic mass fraction, $x_{fm,p}$	12.45%
FM particle material	Magnetite
FM particle density, $\rho_{fm,p}$	5050 kg/m ³
FM particle diameter, $d_{fm,p}$	10nm
FM particle saturation magnetization, $M_{fm,s}$	4.21×10^5 A/m
polymer density, $\rho_{pol,p}$	1050 kg/m ³

Table 8: Fluid and particle properties used in the comparison with Chen et al. [Chen et al. \(2007b\)](#). Underlined are the base case properties.

the wires are long and the fringe effects at the wires' ends are neglected. In addition, in Fig.64(b), the magnetic force density f_m [N/m], is shown for the base case properties. The contour is the magnitude of f_m , whereas the vectors indicate the direction of the force. These findings compare well, both qualitatively and quantitatively, with the results shown in the study of [Chen et al. \(2007b\)](#).

Properties for Chen et al. Comparison - B	
Wire material	SS430
Wire radius, r_w	0.25×10^{-3} m
Wire magnetization saturation, $M_{w,s}$	13.42×10^5 A/m
Magnetic field induction, $\mu_o H_o$	0.125 – <u>0.5</u> T

Table 9: Wire and external field properties used in the comparison with Chen et al. [Chen et al. \(2007b\)](#). Underlined are the base case properties.

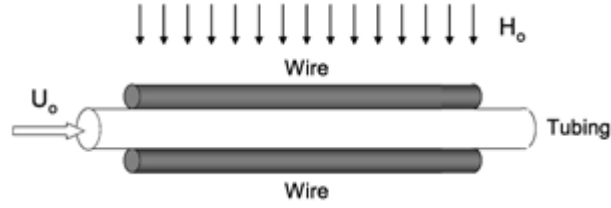


Figure 63: Geometry used in the works of [Chen et al. \(2007b, 2008b,c\)](#).

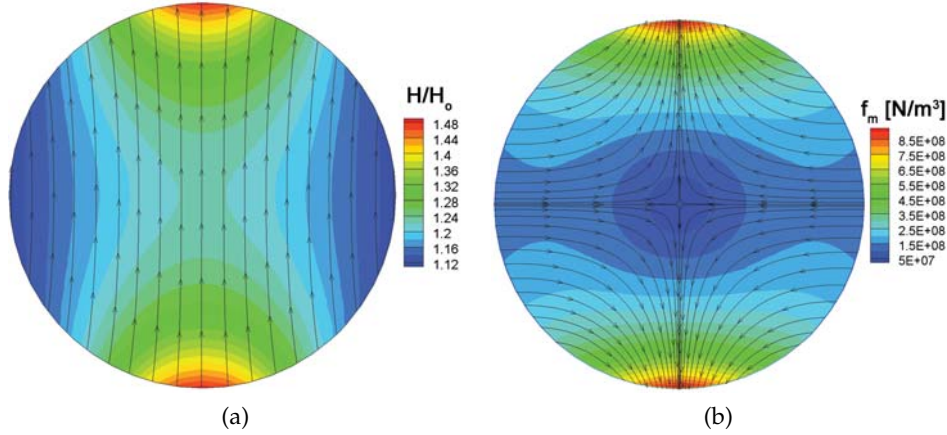


Figure 64: (a) Magnetic field (dimensionless); the streamlines of \vec{H} and its magnitude (contour) are shown. (b) Magnetic force density for base case properties.

Deposition fraction, η , as a function of the magnetic field induction $B_o = \mu_o H_o [T]$ for $v_o = 5\text{cm/s}$ (top) and $v_o = 8\text{cm/s}$ (bottom) is shown in Fig.65. The results of the Eulerian model are compared with the experimental and theoretical findings of [Chen et al. \(2007b\)](#) for the base case properties. The Eulerian model, underestimates η in both cases, the difference being greater for the higher mean fluid velocity, i.e. for $v_o = 8\text{cm/s}$. However, it can be observed that the discrepancy decreases as the magnetic field becomes stronger for both mean fluid velocities. It could be argued that a fluid flow related phenomenon is present at the experiments, that gets less important as the influence from the magnetic field increases.

Moreover, comparison with the theoretical and experimental results of [Chen et al. \(2008c\)](#) (Fig.66) shows that the predictions of the Eulerian model are in agreement with the experimental measurements for low fluid viscosity ($\mu_f = 0.001\text{kg/ms}$), whereas differs from the experiments for $v_o > 2$ in the higher viscosity case ($\mu_f = 0.001\text{kg/ms}$). This may also be an indication of a shear related transport mechanism present at the experiments, but neglected in the simulations.

Nevertheless, in all examined cases the fully Eulerian model is successful in describing the trends of the experimental deposition fraction curves; deposition increases with increasing magnetic field and decreasing fluid velocity. In addition, it is shown that the rate of the deposition fraction decrease with increasing fluid velocity, is higher for higher viscosity liquids.

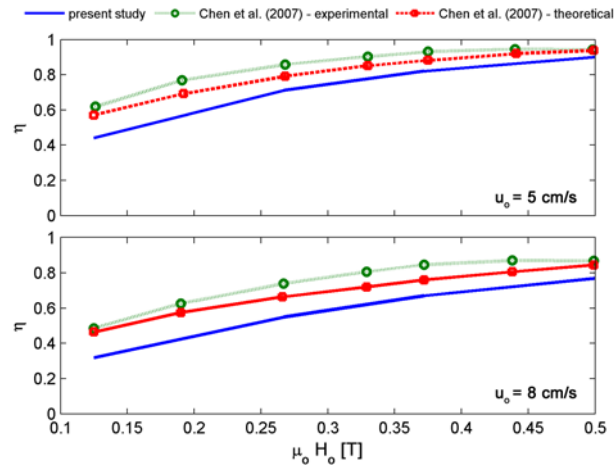


Figure 65: Deposition fraction as a function of the magnetic field induction $B_o = \mu_o H_o$ [T] for $v_o = 5 \text{ cm/s}$ (top) and $v_o = 8 \text{ cm/s}$ (bottom) - Comparison with the results of [Chen et al. \(2007b\)](#).

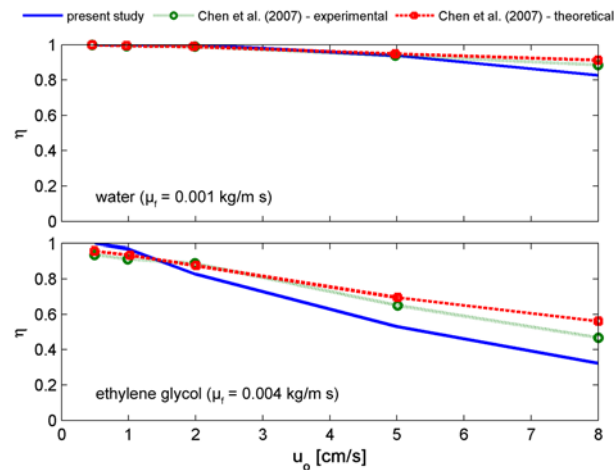


Figure 66: Deposition fraction as a function of the mean fluid velocity v_o [cm/s] ($B_o = \mu_o H_o = 0.5 \text{ T}$) for water, $\mu_f = 0.001 \text{ kgm}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (top), and for Ethylene Glycol, $\mu_f = 0.004 \text{ kgm}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (bottom) - Comparison with the results of [Chen et al. \(2008c\)](#).

6.7 CONCLUSIONS

In Chapter 6, basic concepts of magnetic fields and materials are outlined and the expressions that describe the magnetic fields produced by infinitely long straight wire, a circular line current and ferromagnetic wires in a uniform external field are given. Moreover, the magnetic force acting on particles that have either linear or a superparamagnetic behavior is presented. This force induces the movement of particles with a magnetic velocity, which is incorporated into the particles population balance equation.

The developed fully Eulerian model is used to predict the transport and deposition of magnetizable particles into a liquid medium under the influence of an external magnetic field. Initially, the numerical study of [Haverkort et al. \(2009a\)](#), regarding magnetizable particle flow into water in a 90° bend, is simulated. For the case of the magnetic field produced by an infinitely long straight wire, the results of the present study compare well with those of [Haverkort et al. \(2009a\)](#) for all wire positions, except for the case where the wire is at the inner bend side.

In addition, when the magnetic field is produced by a current carrying loop, the agreement of the Eulerian model with the numerical study of [Haverkort et al. \(2009a\)](#) is excellent for $1\mu\text{m}$ particles and γ angles from 0° to 135° . However, the model predicts lower deposition for the submicron particles regardless the loop position, the differences between the studies being greater as the loop moves from the outer side (0°) of the bend to the inner (180°).

The basis of these discrepancies, is not clear. One may think that this is a sign of a 'missing' deposition mechanism, which is especially important for particles with $d_p < 1\mu\text{m}$.

The model is also used to simulate the experimental and numerical studies of Chen and coworkers ([Chen et al., 2007b, 2008c](#)). The Eulerian model, underestimates deposition fraction compared to the experiments. Although the difference is greater for the higher mean fluid velocity, it is observed that decreases as the magnetic field becomes stronger for both mean fluid velocities. Moreover, the predictions of the present work are in agreement with the experimental measurements for low viscosity fluid, but differs from the experimental results for higher viscosity fluid.

Overall, in all examined cases the fully Eulerian model describes successfully the qualitative characteristics of the experimental deposition fraction curves; deposition increases with increasing magnetic field and decreasing fluid velocity. The discrepancies between the present work and the experimental studies, indicate that maybe a fluid related deposition mechanism is present in the experiments and should be taken into account in modelling. Another explanation for the increased deposition in the experiments, comparing to the calculated ones, could be that the magnetic particles aggregate under the influence of the magnetic field. Thus the same magnetic force density would apply to bigger particles, enhancing that way particle deposition at the tube walls. Particle transport in a liquid medium and the physical phenomena involved should be studied further.

Part IV
EPILOGUE

CONCLUSIONS & FUTURE WORK

The numerical modelling of the transport of particles suspended in flowing biofluids is the main objective of this thesis. The motivation for this work arises from the high scientific interest in the behavior of micro- or nano- particles in the respiratory and circulatory systems. In particular, the mechanisms underlying the particles - fluid interactions are investigated employing techniques of fluid dynamics. The solution of the continuous phase is treated by CFD methods based on an existing code. Special emphasis during development of the model is given in solving the transport of the particulate phase with mechanistic approach. Eventually, it is expected that with appropriate use and then detailed analysis of numerical predictions, the model can contribute to the interpretation of observed effects of particles on respiratory and/or cardiovascular system.

The Particles Transport Equation (PTE) is a special case of the particles Population Balance Equation that does not include internal particle processes (e.g. nucleation, hygroscopic growth and agglomeration). Within an Eulerian description (spatial description), PTE describes particles transport in a given elementary volume. This description results in direct handling of particles diffusion, as well as the straightforward calculation of the particle mass concentration. However, inertial effects can not be easily included in the typical form of PTE. For this reason, an approximate expression of the particles velocity should be used for the integration of their inertial effects in the Eulerian approach.

In the present thesis, the fluid-particle flow in the limit of low mass load and volume fraction is described through an Eulerian formalism. One-sided coupling of dispersed phase (particles) is assumed, whereby the movement of particles is affected by the continuous phase (carrier fluid), but the reverse is not true. The velocity of the dispersed phase contained in the PTE, is expressed at the limit of small particle relaxation time. Finally, the velocity of the particles is decomposed in a diffusion term, which depends on the spatial derivative of the concentration of particles, and a convective part, independent of the concentration.

The convective particle velocity is essentially the velocity of the carrier fluid corrected by a slip velocity due to particle inertia and the total external force acting on the particles (e.g. gravitational and/or magnetic). This way, the particle inertial effects and the influence of external force fields are incorporated in the Eulerian description of PTE. The above treatment of PTE and the use of it to describe the transport and deposition of heavy, inert particles suspended in flowing fluid is the primary innovative aspect of this thesis. The fully Eulerian methodology used offers clear advantages;

- It does not require time and effort consuming particle tracking histories in order to obtain accurate statistics,
- It takes into account particle transport due to diffusion and inertia simultaneously, thus it is valid for a wide range of particle sizes,
- It is fairly simple, as it decouples the mass and momentum equations of the particulate phase and the particle velocity is given only in terms of the fluid velocity and

the its spatial derivative

- Particle concentration is directly calculated as natural part of the solution of the particle transport equation (PTE).

The numerical treatment of the particulate phase transport is based on CFD techniques. In particular, a methodology similar to the one used for the fluid flow, is used because the direct connection of the two codes is desired. Therefore, the particles transport equation is solved in three dimensions using a finite volume method with a collocated arrangement of variables that takes into account grid non-orthogonality and is suitable for multi-block grids. In the code, the convective term is discretized using a second-order deferred correction approach, while a second-order central difference scheme is preferred for the diffusive term. Moreover, we succeeded in proposing and validating a novel numerical approach to the wall boundary condition, where the usual totally absorbing wall condition is combined with the strong convective fluxes towards the wall.

The validation of the proposed methodology shows that particle diffusion and gravitational settling are predicted accurately. More importantly, the validity of the particle velocity approximation for higher particle relaxation times (or equivalently higher Stokes numbers), where inertial effects are important and gravitational settling may not be a priori neglected, is investigated. Thus, the Eulerian model is validated against analytical, numerical, and experimental results on inertia-induced particle deposition efficiencies in a 90° laminar-flow bend of circular cross section.

In particular, model predictions for low Stokes numbers agree with the analytical results, where an ideal fluid flow without the secondary flow is used, slightly overestimating deposition at high Stokes numbers. This is easily understood, if one considers that the secondary flow field is neglected in the analytical solution. Nevertheless, maximum difference was about 10% for the smallest bend curvature ratio (steeper bend), tending to zero as the curvature ratio increases, and therefore sufficiently accurate for practical purposes. In addition, the fully Eulerian approach compared to the experimental data is successful in the prediction of deposition fraction in the bend for both low and high Dean number flows. It is, also, found that the particles deposition sites indicated in the present study are in good agreement with experimental observations. Therefore, the approximation used for the inertial term is valid for high-inertia particles, rendering the developed fully Eulerian methodology adequate for a wide range of particle sizes and, thus, for a variety of applications.

After gaining confidence in our model, the developed Eulerian particle-fluid model is used in order to gain physical insight on the effect of particle inertia in a 90° bend and a physiologically realistic bifurcation. These two geometries though basic, can be considered as building blocks of the respiratory system. The focus is on heavy, inert particles ($d_p \geq 1\mu\text{m}$), where both inertial effects and gravitational settling should be taken into consideration.

Initially, the effect of fluid flow Reynolds number and the bend curvature ratio on both the fluid flow and particle transport in a 90° bend is examined. The influence that the bend orientation with respect to the acceleration of gravity has on particle deposition, is also investigated. For all cases, the simulations refer to heavy, inert particles ($5\mu\text{m} < d_p < 20\mu\text{m}$).

The following results are obtained from the numerical experiments regarding the continuous phase (air);

- Both the axial profiles and the secondary flow characteristics depend on the flow Dean number, which is, in turn, a function of the flow Reynolds number and the bend curvature ratio.
- The curvature ratio affects differently the axial velocity profiles and the structure of the secondary flow field for low and high Reynolds numbers; for $Re = 100$, the flow is almost independent of the bend curvature ratio, whereas for $Re > 500$ the influence of R_o is obvious on velocity profiles. New pairs of symmetric vortices form with decreasing curvature ratio (steeper bend) in the latter case. For all Reynolds numbers, however, there is no shifting of the axial velocity profiles towards the outer bend wall as the curvature ratio decreases.
- The effect of Reynolds number on the fluid flow is significant regardless of the curvature ratio. There seems to be a minimum Re , above of which the axial velocity profile does not move further towards the outer bend wall, implying that the inertial forces dominate and the centrifugal ones cannot influence further the fluid flow in the bend. For a given bend curvature ratio, increase of Reynolds number leads to the shifting of the secondary flow vortices towards the inner bend wall and the center of the cross-section, in addition to the formation of new pairs of symmetric vortices.

Regarding the particulate phase, it is found that;

- Gravitational settling is an important deposition mechanism and should not be a priori neglected.
- The orientation of the tube is more important for low Reynolds number aerosol flows, where inertial effects are weaker. For $Re = 100$ and comparing to simulations without gravity (CDI), deposition fraction for the CDIGx case is considerably higher for the whole range of particle sizes under study, for the CDIGy case is comparable and for the CDIGz deposition is higher for particle Stokes numbers less than unity and lower for bigger particles. For $Re = 1000$, CDI, CDIGx and CDIGy orientations yield comparable deposition fractions, whereas deposition for the CDIGz orientation is considerably lower.
- For low Stokes number particles concentration profiles do not change significantly for the CDIGx and CDIGy cases compared to the CDI for both low and high Reynolds numbers, whereas for high Stokes number particles there are obvious differences between the aforementioned cases (especially for higher Dean number aerosol flow). At the concentration profiles for the CDIGz case, the asymmetric accumulation of particles towards the lower lateral bend wall can be noticed even for the low Stokes number particles.
- Gravity alters significantly the locations, where particles deposit. The differences between the various bend orientations are more pronounced for low Dean number flows regardless the size of the particle. For all Stokes and Dean numbers, there is

an obvious asymmetry in the deposition sites for the CDIGz orientation.

- The influence of Reynolds number and bend curvature ratio on inertial particle transport is studied, without taking into account gravity (CDI case). Deposition fraction increases with increasing Reynolds number. However, it is noticed that the rate of the increase becomes smaller. Particle concentration profiles and deposition sites are affected by Reynolds number, the differences being more obvious for high Stokes number particles.
- The bend curvature ratio is important for the transport of particles only for low Reynolds number flows, where deposition fraction increases with decreasing R_o , that is as the bend becomes steeper and thus the inertial effects stronger. Moreover, it is shown that the patterns of particle concentration profiles and deposition sites are not particularly changed with the bend curvature ratio.

Following the investigation of the academic case of aerosol flow in a 90° bend, numerical experiments of particle transport and deposition in a physiologically realistic bifurcation are conducted in order to determine the effect of particle size and fluid flow Reynolds number and symmetry. It is found that;

- Total particle deposition fraction is loosely dependent on fluid flow Reynolds number and does not change significantly between symmetric $Q_1/Q_2 = 1$ and asymmetric $Q_1/Q_2 = 2$ flow conditions, but is considerably lower for the totally obstructed case, $Q_2 = 0$.
- Deposition sites and particle concentration profiles depend on these parameters. While deposition at the bifurcation is present at all cases, deposition sites downstream the bifurcation move towards the outer PRB wall and daughter tube exit as Reynolds number increases. For the $Q_2 = 0$, it is also shown that particles are trapped and deposit even in the obstructed daughter tube.
- It is found that there is a particle-free region at the outer wall, at the beginning of the daughter tubes opposite the bifurcation, which is present in all examined cases.

Besides detailed results in the respiratory system, the developed model is appropriate for current biomedical approaches in the cardiovascular system, as well. More specifically, the developed model is used to predict the transport and deposition of magnetizable particles into a liquid medium under the influence of an external magnetic field. Initially, the numerical study of [Haverkort et al. \(2009a\)](#), regarding magnetizable particle flow into water in a 90° bend, is simulated. The following conclusions are derived;

- For the case of the magnetic field produced by an infinitely long straight wire, the results of the present study compare well with those of [Haverkort et al. \(2009a\)](#) for all wire positions, except for the case where the wire is at the inner bend side.
- When the magnetic field is produced by a current carrying loop, the agreement of the Eulerian model with the numerical study of [Haverkort et al. \(2009a\)](#) is excellent

for $1\ \mu\text{m}$ particles and γ angles from 0° to 135° . However, the model predicts lower deposition for the submicron particles regardless the loop position, the differences between the studies being greater as the loop moves from the outer side (0°) of the bend to the inner (180°).

- The basis of these discrepancies, is not clear. One may think that this is a sign of a 'missing' deposition mechanism, which is especially important for particles with $d_p < 1\ \mu\text{m}$.

The model is also used to simulate the experimental and numerical studies of Chen and coworkers (Chen et al., 2007b, 2008c) and it is found that;

- The Eulerian model, systematically underestimates deposition fraction compared to the experiments.
- The difference is greater for higher mean fluid velocity, but decreases as the magnetic field becomes stronger for both mean fluid velocities.
- The predictions of the present work are in agreement with the experimental measurements for low viscosity fluid, but differs from the experimental results for higher viscosity fluid.
- The fully Eulerian model describes successfully the qualitative characteristics of the experimental deposition fraction curves in the case of magnetophoresis of particles suspended in liquid medium; deposition increases with increasing magnetic field and decreasing fluid velocity.
- The discrepancies between the present work and the experimental studies, indicate that maybe a fluid related deposition mechanism is present in the experiments and should be taken into account in modelling.

The aforementioned conclusions demonstrate that accurate predictions of the transport and deposition of heavy, inert particles suspended in flowing fluid are obtained by the proposed methodology, that is, the incorporation of the particle inertial effects in an Eulerian description of the particles transport equation and the numerical treatment of this equation with CFD techniques. In addition, the use of the model to obtain, not only the particles deposition fractions, but also the characteristics of particle deposition and concentration patterns, offers useful physical insight under different flow conditions, in a straightforward and simple manner.

The proposed methodology is versatile enough to account for both air-particles (respiratory system) and liquid-particles (circulatory system) flows. However, it can be further improved by incorporating more physical phenomena involved in particle transport in fluids. For example, the model will be substantially improved, if internal aerosol processes are incorporated in it, thus solving the full General Dynamic Equation of Particles. In analogy for colloidal systems, colloid interactions, such as van der Waals and/or electrical double-layer interactions can be added. Moreover, the model can be

modified to account for unsteady fluid-particles flows. Finally, the model can be adapted to calculate transport of polydispersed and/or non-spherical particle populations, which often occurs in practice.

ΣΥΝΟΨΗ



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΚΑΙ ΡΕΟΝΤΩΝ ΒΙΟΡΕΥΣΤΩΝ**

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΜΑΡΙΚΑ ΠΗΛΟΥ

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού Ε.Μ.Π

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:

Σ. ΤΣΑΓΓΑΡΗΣ

Καθηγητής Ε.Μ.Π.

ΑΘΗΝΑ, Ιούνιος 2012



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΚΑΙ ΡΕΟΝΤΩΝ ΒΙΟΡΕΥΣΤΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΜΑΡΙΚΑ ΠΗΛΟΥ

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού Ε.Μ.Π

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

1. Σ. Τσαγγάρης, Καθ. Ε.Μ.Π. (επιβλέπων)
2. Χρ. Χουσιάδας, Ερευνητής Α' Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»
3. Ε. Χίνης, Αναπλ. Καθ. Ε.Μ.Π.

ΕΠΤΑΜΕΛΗΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

1. Σ. Τσαγγάρης, Καθ. Ε.Μ.Π. (επιβλέπων)
2. Χρ. Χουσιάδας, Ερευνητής Α' Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»
3. Ε. Χίνης, Αναπλ. Καθ. Ε.Μ.Π.
4. Δ. Παπαντώνης, Καθ. Ε.Μ.Π.
5. Δ. Μαθιουλάκης, Αναπλ. Καθ. Ε.Μ.Π.
6. Ι. Αναγνωστόπουλος, Επικ. Καθ. Ε.Μ.Π.
7. Β. Ριζιώτης, Λέκτορας Ε.Μ.Π.

Η έγκριση της διδακτορικής διατριβής από την Ανώτατη Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών του Ε.Μ. Πολυτεχνείου δεν υποδηλώνει αποδοχή των γνώμων του συγγραφέα (Ν.5343/1932, Άρθρο 202).

ΑΘΗΝΑ, Ιούνιος 2012

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η αριθμητική μοντελοποίηση της μεταφοράς σωματιδίων που βρίσκονται διασκορπισμένα σε ρέοντα βιορευστά είναι ο βασικός σκοπός της παρούσας διατριβής. Συγκεκριμένα, διερευνώνται οι μηχανισμοί που διέπουν τις αλληλεπιδράσεις σωματιδίων - ρευστών χρησιμοποιώντας τεχνικές της δυναμικής ρευστών. Η συνεχής φάση (ρευστό) επιλύεται με χρήση υπάρχοντος κώδικα, ο οποίος βασίζεται σε μεθόδους της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (computational fluid dynamics - CFD). Ιδιαίτερη σημασία κατά την ανάπτυξη του μοντέλου δόθηκε στην επίλυση της μεταφοράς της σωματιδιακής φάσης με προσέγγιση Euler. Η χρήση της περιγραφής κατά Euler έχει ως αποτέλεσμα την άμεση αντιμετώπιση της διάχυσης των σωματιδίων και του υπολογισμού τη συγκέντρωσης τους. Ωστόσο, τα αδρανειακά φαινόμενα δεν ενσωματώνονται εύκολα στην κατά Euler μορφή της Εξίσωσης Μεταφοράς των Σωματιδίων (particle transport equation - PTE). Για να συμπεριληφθούν, επομένως, τα αδρανειακά φαινόμενα στην μεθοδολογία Euler, θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί μια προσεγγιστική έκφραση για την ταχύτητα της σωματιδιακής φάσης.

Στην παρούσα διατριβή, χρησιμοποιείται προσέγγιση Euler για την περιγραφή της ροής ρευστού - σωματιδίων στο όριο του χαμηλού φορτίου μάζας και μικρού κλάσματος όγκου. Θεωρείται μονόπλευρη σύζευξη της σωματιδιακής φάσης, το οποίο σημαίνει ότι η ροή του ρευστού επηρεάζει αυτή των σωματιδίων, αλλά το αντίθετο δεν ισχύει. Η ταχύτητα της σωματιδιακής φάσης που περιέχεται στην PTE, εκφράζεται στο όριο του μικρού χρόνου χαλάρωσης των σωματιδίων. Τελικά, η ταχύτητα των σωματιδίων αποτελείται από έναν όρο διάχυσης, ο οποίος εξαρτάται από την κλίση της συγκέντρωσης των σωματιδίων, και έναν όρο συναγωγής, ανεξάρτητο της συγκέντρωσης. Η σωματιδιακή ταχύτητα συναγωγής είναι ουσιαστικά η ταχύτητα του φέροντος αερίου διορθωμένη από την ταχύτητα ολίσθησης εξαιτίας της αδράνειας των σωματιδίων και της ολικής εξωτερικής δύναμης που ασκείται στα σωματίδια. Κατά αυτόν τον τρόπο, τα αδρανειακά φαινόμενα της σωματιδιακής φάσης και η επίδραση εξωτερικών πεδίων δυνάμεων ενσωματώνονται επιτυχώς στην κατά Euler περιγραφή της PTE.

Η προαναφερθείσα αντιμετώπιση της PTE και η εφαρμογή της για την περιγραφή της μεταφοράς και εναπόθεσης βαρέων, αδρανειακών σωματιδίων που αιωρούνται διασκορπισμένα σε ρέοντα ρευστά είναι η κύρια καινοτομία της παρούσας διατριβής. Η πλήρως κατά Euler περιγραφή προσφέρει ξεκάθαρα πλεονεκτήματα: α) δεν απαιτείται ο δαπανηρός, σε χρόνο και προσπάθεια, υπολογισμός της τροχιάς πληθώρας σωματιδίων για τη λήψη στατιστικά ακριβούς λύσης, β) λαμβάνει υπόψη ταυτόχρονα τη μεταφορά των σωματιδίων εξαιτίας της διάχυσης και της αδράνειας, και για αυτό είναι κατάλληλη για μεγάλο εύρος μεγέθους σωματιδίων, γ) είναι σχετικά απλή, αφού διαχωρίζει τις εξισώσεις μάζας και ορμής της σωματιδιακής φάσης και η ταχύτητα των σωματιδίων δίνεται σε όρους της ταχύτητας του ρευστού και των χωρικών παραγώγων αυτής, και δ) η συγκέντρωση των σωματιδίων υπολογίζεται άμεσα, ως μέρος της επίλυσης της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων.

Η αριθμητική αντιμετώπιση της σωματιδιακής φάσης βασίζεται σε τεχνικές CFD. Συγκεκριμένα, η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων επιλύεται στις τρεις διαστάσεις χρησιμοποιώντας μια μεθοδολογία πεπερασμένων όγκων με ομόθετη διάταξη μεταβλητών, η οποία λαμβάνει υπόψη τη μη-ορθογωνιότητα των πλεγμάτων και είναι

κατάλληλη για πολλαπλών χωρίων (multi-grid) πλέγματα. Στον κώδικα ο όρος της συναγωγής διακριτοποιείται με χρήση μιας προσέγγισης αναβαλλόμενης διόρθωσης (deferred correction) 2^{ης} τάξης, ενώ ένα σχήμα κεντρικών διαφορών 2^{ης} τάξης χρησιμοποιείται για τον όρο διάχυσης. Επιπλέον, στην παρούσα εργασία προτείνεται και πιστοποιείται η χρήση μιας νέας αριθμητικής προσέγγισης για τη συνοριακή συνθήκη στο τοίχωμα, όπου η συνήθης συνοριακή συνθήκη του πλήρως απορροφητικού τοιχώματος συνδυάζεται με τις ισχυρές ροές συναγωγής προς το τοίχωμα.

Κατά την πιστοποίηση της προτεινόμενης μεθοδολογίας τεκμηριώνουμε ότι η διάχυση και η βαρυτική καθίζηση προβλέπονται με άριστη ακρίβεια. Σημαντικότερος είναι πάντως ο έλεγχος της προσεγγιστικής έκφρασης για την ταχύτητα των σωματιδίων στις περιπτώσεις μεγάλων χρόνων χαλάρωσης (ή ισοδύναμα μεγάλων αριθμών Stokes), όπου τα αδρανειακά φαινόμενα είναι σημαντικά και η επίδραση της βαρύτητας δε μπορεί εκ των προτέρων να θεωρηθεί αμελητέα. Τα αποτελέσματα του αναπτυχθέντος μοντέλου συγκρίνονται, λοιπόν, με αναλυτικές, πειραματικές και αριθμητικές εργασίες της βιβλιογραφίας. Η σύγκριση δείχνει ότι η προτεινόμενη μεθοδολογία μπορεί με επιτυχία να προβλέψει την εναπόθεση των αδρανειακών σωματιδίων, και ότι οι περιοχές εναπόθεσης των σωματιδίων που υποδεικνύονται από το μοντέλο συμφωνούν με τις πειραματικές παρατηρήσεις.

Το μοντέλο που αναπτύχθηκε χρησιμοποιείται για τη μελέτη της τριδιάστατης μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων που βρίσκονται διεσπαρμένα σε κινούμενα ρευστά μέσα σε απλές γεωμετρίες, οι οποίες, ωστόσο, μπορούν να θεωρηθούν ως δομικά στοιχεία τόσο του αναπνευστικού, όσο και το καρδιαγγειακού συστήματος. Συγκεκριμένα, το αναπτυχθέν μοντέλο χρησιμοποιείται για τη μελέτη των αδρανειακών φαινομένων σε αερολύματα εντός μιας γωνιάς 90° κυκλικής διατομής, όπως επίσης και εντός μιας φυσιολογικά ρεαλιστικής διακλάδωσης (physiologically realistic bifurcation - PRB). Πρόσθετα, το μοντέλο χρησιμοποιείται για τη διερεύνηση της μεταφοράς και επικάθισης μαγνητικών σωματιδίων, διεσπαρμένων σε υγρό μέσο, υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

Οι προαναφερθείσες μελέτες δείχνουν ότι με κατάλληλη χρήση και, κατόπιν, ανάλυση των αποτελεσμάτων, το προτεινόμενο μοντέλο μπορεί να συνεισφέρει στην ερμηνεία της συμπεριφοράς των σωματιδίων στο αναπνευστικό ή/και καρδιαγγειακό σύστημα, προσφέροντας καλύτερη κατανόηση των εμπλεκόμενων φυσικών φαινομένων και όντας ένα χρήσιμο εργαλείο για το σχεδιασμό και τη βελτιστοποίηση βιοϊατρικών εφαρμογών.

Η έκθεση σε αιωρούμενα σωματίδια που βρίσκονται στην ατμόσφαιρα έχει συνδεθεί με σοβαρά προβλήματα υγείας, όπως αυξημένη νοσηρότητα του αναπνευστικού και του καρδιαγγειακού συστήματος, ακόμα και με αυξημένη θνησιμότητα σύμφωνα με πλείστες επιδημιολογικές μελέτες (Russell and Brunekreef, 2009; Mills et al., 2009; Dvonch et al., 2009). Πρόσθετα, νεότερα στοιχεία δείχνουν ότι τα λεπτά σωματίδια μπορούν να διαπεράσουν το επιθήλιο των πνευμόνων και του γαστρεντερικού σωλήνα καθώς και το δέρμα, με αποτέλεσμα την εισαγωγή σημαντικής ποσότητας σωματιδίων στο αίμα και τη μεταφορά τους στους ιστούς (Simkhovich et al., 2008). Αναδυόμενες νέες τεχνολογίες, όπως η Νανοτεχνολογία, ενδέχεται να θέτουν νέους παράγοντες διακινδύνευσης λόγω της έκθεση σε μικρο- και νανοσωματίδια. Από την άλλη πλευρά, νέες δυνατότητες προκύπτουν στην Ιατρική μέσω της ανάπτυξης ναοφαρμάκων και νανοδιαγνωστικών συστημάτων, τα οποία εισάγονται στο αναπνευστικό και καρδιαγγειακό σύστημα για διαγνωστικούς ή/και θεραπευτικούς σκοπούς (Sung et al., 2007; Gagnadoux et al., 2008; Plank, 2008; Dusinska et al., 2009; Misra et al., 2011). Η συμπεριφορά των σωματιδίων σε αυτά τα συστήματα είναι σήμερα ένας τομέας που παρουσιάζει αυξημένο επιστημονικό ενδιαφέρον.

Το αιώρημα σωματιδίων εντός ρευστού συνιστά ένα πολυφασικό σύστημα, δηλαδή ένα σύστημα που αποτελείται από ένα συνδυασμό φάσεων. Δυο συστήματα ρευστού-σωματιδίων είναι ιδιαίτερης σημασίας στις βιοϊατρικές εφαρμογές: το αιώρημα στερεών ή υγρών σωματιδίων εντός αερίου, που καλείται αερόλυμα, και το αιώρημα στερεών σωματιδίων εντός υγρού, γνωστό ως κολλοειδές. Οι όροι αερόλυμα και κολλοειδές αναφέρονται ταυτόχρονα τόσο στα σωματίδια όσο και στο φέρον ρευστό, δηλαδή στην διφασική ροή. Για να αναφερθούμε συγκεκριμένα στο ρευστό χρησιμοποιείται ο όρος συνεχής φάση, ενώ για τα αιωρούμενα σωματίδια χρησιμοποιούνται οι όροι διασκορπισμένη ή σωματιδιακή φάση.

Στις εφαρμογές που μας ενδιαφέρουν στην παρούσα μελέτη, το μέγεθος των σωματιδίων κυμαίνεται από μερικά νανόμετρα ($1\text{nm}=10^{-9}\text{ m}$) ως αρκετά μικρόμετρα ($1\mu\text{m}=10^{-6}\text{ m}$). Πρόσθετα, για τη πλειοψηφία των διφασικών ροών στο αναπνευστικό και καρδιαγγειακό σύστημα, η σωματιδιακή φάση είναι αρκετά αραιωμένη (ο συνολικός όγκος των σωματιδίων δε ξεπερνά το 0.0001% του συνολικού όγκου), οπότε μπορούμε να θεωρήσουμε μονόπλευρη σύζευξη των φάσεων. Αυτό σημαίνει ότι παρόλο που η συμπεριφορά των σωματιδίων στο σύστημα επηρεάζεται από τη ροή του ρευστού, η σωματιδιακή φάση έχει αμελητέα επίδραση στο φέρον ρευστό.

Στην πράξη, ο πληθυσμός των αιωρούμενων σωματιδίων μεταβάλλεται εξαιτίας διαφόρων φυσικών διεργασιών, όπως πυρηνοποίηση, υγροσκοπική διόγκωση και συσσωμάτωση ή συνάθροιση. Επιπλέον, τα σωματίδια κινούνται λόγω της ροής του φέροντος ρευστού, την ύπαρξη κλίσεων (π.χ. διάχυση, θερμοφόριση, ηλεκτροφόριση) και την επίδραση εξωτερικών πεδίων δυνάμεων.

Η μοντελοποίηση της δυναμικής και της μεταφοράς των σωματιδίων, μπορεί να είναι ιδιαίτερα αποδοτική για τους ακόλουθους λόγους: α) μπορεί να βοηθήσει στην κατανόηση των φυσικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα δίχως την χρήση πειραμάτων, και β) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραμετρική μελέτη υπό ανάπτυξη διφασικών συστημάτων και τη βελτιστοποίηση ήδη υπαρχόντων. Φυσικά η μοντελοποίηση της σωματιδιακής φάσης πρέπει να συνδυαστεί με την

αντίστοιχη μοντελοποίηση της ροής του ρευστού, αφού στις περισσότερες εφαρμογές, συμπεριλαμβανομένων των βιοϊατρικών, τα συστήματα ρευστού-σωματιδίων βρίσκονται εν κινήσει (ρέουν). Συχνά, μάλιστα, οι ροές αυτές είναι τριδιάστατες και αρκετά περίπλοκες.

Στην παρούσα διατριβή εξετάζονται τα συστήματα ρευστού-σωματιδίων σε ροές βιορευστών. Οι συνηθέστερες ροές βιορευστών είναι η ροή του αέρα στο αναπνευστικό σύστημα και η ροή του αίματος στο καρδιαγγειακό. Ιστορικά, πρώτα μελετήθηκε η ροή σωματιδίων στο αναπνευστικό σύστημα. Ακόμα και ο Leonardo Da Vinci ενδιαφέρθηκε για την εναπόθεση σκόνης στους πνεύμονες.

Τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται για τα συστήματα ρευστού-σωματιδίων στο αναπνευστικό σύστημα συνήθως διακρίνονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες: τα εμπειρικά και τα μηχανιστικά (Housiadas and Lazarides, 2010). Τα πρώτα βασίζονται σε ένα συνδυασμό θεωρητικών και εμπειρικών σχέσεων και είναι αρκετά απλά για πρακτικές εφαρμογές. Ωστόσο, η εφαρμογή τους περιορίζεται στις συνθήκες, υπό τις οποίες υπολογίστηκαν οι παράμετροι τους, και από το ότι δεν λαμβάνουν υπόψη τη δυναμική των σωματιδίων. Τα μηχανιστικά μοντέλα, αντίθετα, προβλέπουν τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων ως αποτέλεσμα διαφόρων φυσικών διεργασιών και το μεγαλύτερο πλεονέκτημά τους είναι ότι μπορούν να εφαρμοστούν για μια πληθώρα συνθηκών.

Μια υποκατηγορία των μηχανιστικών μοντέλων είναι αυτά που βασίζονται σε τεχνικές της υπολογιστικής ρευστομηχανικής (computational fluid dynamics - CFD). Αν και αυτά τα μοντέλα είναι περίπλοκα και συνήθως υπολογιστικά δαπανηρά, και για αυτό το λόγο όχι κατάλληλα για πρακτικές εφαρμογές, έχουν ισχυρή φυσική βάση με αποτέλεσμα τόσο το πεδίο ροής του ρευστού, όσο και η συγκέντρωση των σωματιδίων να υπολογίζονται με λεπτομέρεια. Τα μοντέλα της σωματιδιακής φάσης που βασίζονται σε CFD είναι, επομένως, κατάλληλα ιδιαίτερα για την προσομοίωση των μικροφυσικών λεπτομερειών των σύνθετων ροών αερολυμάτων στο αναπνευστικό σύστημα (Housiadas and Lazarides, 2010).

Τα CFD, μηχανιστικά μοντέλα μπορούν να κατηγοριοποιηθούν περαιτέρω σε δύο κύριες κατηγορίες ανάλογα με το πλαίσιο περιγραφής της κίνησης του ρευστού και των σωματιδίων. Υπάρχει, λοιπόν, η Lagrangian ή σωματιδιακή περιγραφή, όπου χρησιμοποιείται ένα κινούμενο πλαίσιο αναφοράς, και η Eulerian ή χωρική περιγραφή, όπου χρησιμοποιείται ένα σταθερό πλαίσιο αναφοράς.

Η αριθμητική μοντελοποίηση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων, τα οποία είναι διασκορπισμένα εντός ρεόντων βιορευστών, είναι ο κύριος στόχος της παρούσας διατριβής. Συγκεκριμένα, το ενδιαφέρον επικεντρώνεται στη μελέτη της επίδρασης της αδράνειας και των εξωτερικών μαζικών δυνάμεων στη μεταφορά και εναπόθεση των σωματιδίων στα «τοιχώματα» του αναπνευστικού και κυκλοφορικού συστήματος.

Η αδράνεια των σωματιδίων είναι σημαντική σε πολλές εφαρμογές συστημάτων ρευστού-σωματιδίων και έχει διερευνηθεί αναλυτικά, πειραματικά και αριθμητικά στη βιβλιογραφία. Η απλή, ακαδημαϊκή, γεωμετρία μιας γωνιάς 90° με κυκλική διατομή, χρησιμοποιείται συχνά σε αυτές τις μελέτες, όπου τα αδρανειακά φαινόμενα των σωματιδίων αναδεικνύονται εύκολα εξαιτίας της αλλαγής κατεύθυνσης της ροής του ρευστού.

Η πιο διεξοδική πειραματική εργασία για την εναπόθεση σωματιδίων σε γωνιά 90° με κυκλική διατομή ως τώρα έχει διεξαχθεί από τους (Pui et al., 1987), και αφορούσε μετρήσεις τόσο σε στρωτή όσο και τυρβώδη ροή με μονοδιαεσπαρμένα σωματίδια. Οι γωνιές είχαν διαφορετικές διαμέτρους d_i και οι λόγοι καμπυλότητας της γωνιάς R_o ,

που ορίζονται ως $R_o = R_b / (d_t / 2)$ με R_b την ακτίνα της γωνιάς, κυμαίνονταν από 5.6 ως 7.

Θεωρητικοί υπολογισμοί της εναπόθεσης σωματιδίων σε γωνιά 90° κυκλικής διατομής εξαιτίας της αδράνειας έγιναν αρχικά από τους (Cheng and Wang, 1975). Η αναλυτική λύση των εξισώσεων κίνησης των σωματιδίων που πρότειναν για την εύρεση της εναπόθεσης υποθέτει μια ιδανική, αναλυτική, αξονική ροή ρευστού, η οποία αμελεί εντελώς τη δευτερεύουσα ροή εντός της γωνιάς. Με βάση αυτή τη λύση συμπέραναν ότι το κλάσμα εναπόθεσης δεν εξαρτάται ιδιαίτερα από το λόγο καμπυλότητα της γωνιάς. Αργότερα, σε μια δεύτερη δημοσίευση τους (Cheng and Wang, 1981), χρησιμοποίησαν το αναλυτικό, στρωτό πεδίο ροής των Mori and Nakayama (1965) για τον υπολογισμό της εναπόθεσης των σωματιδίων λόγω αδράνειας για αριθμούς Reynolds (Re) 100 και 1000 και $R_o = 8$. Η ροή των Mori & Nakayama περιγράφει μια πλήρως ανεπτυγμένη ροή εντός της γωνιάς, όπου η δευτερεύουσα ροή προσεγγίζεται από μια κεντρική περιοχή και ένα οριακό στρώμα, η οποία όμως είναι συμπιεστή. Από αυτήν τη μελέτη συμπέραναν ότι το κλάσμα εναπόθεσης εξαρτάται κατά κύριο λόγο από τον αριθμό Stokes των σωματιδίων, ένα αδιάστατο μέτρο της αδράνειας των σωματιδίων, και από τον αριθμό Reynolds. Τα αριθμητικά τους αποτελέσματα ήταν κοντά στα πειραματικά ευρήματα των Pui et al. (1987) για τη ροή υψηλού αριθμού Reynolds ($Re = 1000$), αλλά διέφεραν για τη ροή χαμηλού αριθμού Reynolds ($Re = 100$). Ένας λόγος για αυτή τη διαφορά είναι ότι το αναλυτικό μοντέλο ροής που χρησιμοποίησαν δεν είναι κατάλληλο για ροές χαμηλού αριθμού Reynolds.

Η εναπόθεση σωματιδίων εξαιτίας της αδράνειας τους έχει, επίσης, μελετηθεί με αριθμητικές μεθόδους. Οι Crane and Evans (1977), έλυσαν τη συνεχή φάση (φέρων αέριο) χρησιμοποιώντας την αριθμητική τεχνική του Rowe και τη σωματιδιακή φάση χρησιμοποιώντας Lagrangian μεθοδολογία. Χρησιμοποίησαν μια αξονοσυμμετρική κατανομή ταχύτητας στην είσοδο για την εύρεση της δευτερεύουσας ροής, και προσομοίωσαν τυρβώδεις ροές σωματιδίων σε μια γωνιά με λόγο καμπυλότητας 4. Η μελέτη τους κατέληξε στο ότι η δευτερεύουσα ροή επηρεάζει ισχυρά τις τροχιές των σωματιδίων, όχι όμως και το κλάσμα εναπόθεσης.

Μια πιο ρεαλιστική προσέγγιση του αναπτυσσόμενου τριδιάστατου πεδίου ροής εντός μια γωνιάς 90° υιοθετήθηκε από τους Tsai and Pui (1990), οι οποίοι υπολόγισαν τη ροή του ρευστού με έναν τριδιάστατο, ελλειπτικό κώδικα πεπερασμένων διαφορών. Η εναπόθεση των σωματιδίων υπολογίστηκε μέσω της επίλυσης των εξισώσεων κίνησης των σωματιδίων. Εκτός από την επίδραση του αριθμού Stokes στο κλάσμα εναπόθεσης, μελέτησαν και την επίδραση του αριθμού Dean ($De = Re / \sqrt{R_o}$), του λόγου καμπυλότητας και της κατανομής της ταχύτητας στην είσοδο της γωνιάς. Αργότερα, οι Breuer et al. (2006), προσομοίωσαν τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε γωνιά 90° κυκλικής διατομής χρησιμοποιώντας Προσομοιώσεις Μεγάλων Δινών (Large-Eddy Simulations - LES) για τη ροή και Lagrangian μεθοδολογία για τα σωματίδια. Μελέτησαν την εναπόθεση σε ροή με $Re = 10000$, αλλά πιστοποίησαν τη μεθοδολογία του σε ροή με $Re = 1000$. Τα αποτελέσματα τους είχαν καλή συμφωνία με πειραματικά και άλλα αριθμητικά αποτελέσματα.

Όλες οι προαναφερθείσες αριθμητικές μέθοδοι χρησιμοποιούν περιγραφή κατά Lagrange για τη σωματιδιακή φάση, κατά την οποία επλύνονται, είτε αριθμητικά ή αναλυτικά, οι εξισώσεις κίνησης των σωματιδίων. Η προσέγγιση αυτή είναι η συχνότερα χρησιμοποιούμενη, επειδή προσφέρει μια βολική και εύκολη στην εφαρμογή της μεθοδολογία για την αντιμετώπιση των αδρανειακών φαινομένων. Ωστόσο, ο υπολογισμός σημαντικών μεγεθών, όπως είναι η τοπική συγκέντρωση

σωματιδίων (Slater and Young, 2001) ή η μέση μεταφορά ορμής μεταξύ των φάσεων (Garg et al., 2009), είναι ιδιαίτερα δύσκολος. Είναι αναγκαίος ο υπολογισμός της τροχιάς ενός μεγάλου αριθμού σωματιδίων για την ελαχιστοποίηση του στατιστικού σφάλματος (Desjardins et al., 2008), καθιστώντας την Lagrangian προσέγγιση υπολογιστικά μη αποδοτική. Ο έλεγχος του αριθμητικού σφάλματος στις Eulerian-Lagrangian προσομοιώσεις γίνεται πιο σημαντικός για έντονα ανομοιομορφες κατανομές σωματιδίων καθώς ο αριθμός των σωματιδίων που υπολογίζονται ανα κελί πλέγματος μειώνεται, ενώ το στατιστικό σφάλμα που είναι αντιστρόφως ανάλογο της τετραγωνικής ρίζας του αριθμού των σωματιδίων ανα κελί, αυξάνει (Garg et al., 2009). Πρόσφατες βελτιώσεις στη Eulerian-Lagrangian μεθοδολογία αντιμετωπίζουν το πρόβλημα αυτό με καλύτερες εκτιμήτριες σφάλματος για τη λήψη αριθμητικά συγκλινόντων αποτελεσμάτων (Garg et al., 2009). Πρόσθετα, αν η Brownian διάχυση των σωματιδίων είναι σημαντική, ο αριθμός των σωματιδίων, των οποίων η τροχιά θα υπολογιστεί, αυξάνει περαιτέρω ώστε να μειωθεί ο θόρυβος που παράγεται από τη στοχαστική κίνηση των σωματιδίων.

Σημαντικές εναλλακτικές προσεγγίσεις στους Eulerian-Lagrangian υπολογισμούς αποτελούν οι εργασίες των Lawson et al. (2006) και Armand et al. (1998). Οι πρώτοι επιχείρησαν να υπολογίσουν τη συγκέντρωση των σωματιδίων σε μια γωνιά, χρησιμοποιώντας την πλήρως Lagrangian μεθοδολογία των Healy and Young (2005). Με αυτόν τον τρόπο, η συγκέντρωση των σωματιδίων προσδιορίστηκε με τον υπολογισμό της παραμόρφωσης (διαστολής ή συμπίεσης) ενός απειροελάχιστου ορθογωνικού όγκου στην κατεύθυνση της τροχιάς ενός σωματιδίου. Οι Armand et al. (1998) πρότειναν και πιστοποίησαν, τόσο σε στρωτές όσο και τυρβώδεις ροές, μια Eulerian προσέγγιση, η οποία συμπεριλάμβανε εκτροπή των σωματιδίων λόγω αδράνειας σε ένα μοντέλο δυο ρευστών. Η ταχύτητα των σωματιδίων προσδιορίστηκε επιλύοντας αριθμητικά τις συζευγμένες εξισώσεις μάζας και ορμής της σωματιδιακής φάσης. Επιπρόσθετα, προσέγγισαν τη ροή εντός μιας γωνιάς 90° κυκλικής διατομής με τη ροή ανάμεσα σε δυο καμπυλωμένες παράλληλες πλάκες και τα αποτελέσματά τους ήταν κοντά στα πειραματικά δεδομένα των Pui et al. (1987) και την αριθμητική λύση των Tsai and Pui (1990) για $Re = 1000$.

Η εξίσωση ισορροπίας πληθυσμού των σωματιδίων (particle population balance equation - PBE) σε περιγραφή Euler, εξετάζει τις διεργασίες του αερολύματος (π.χ. συναγωγή, πυρηνοποίηση, ανάπτυξη και συσσωμάτωση) σε έναν σταθερό στοιχειώδες όγκο, οπότε η διάχυση αντιμετωπίζεται άμεσα και η συγκέντρωση των σωματιδίων υπολογίζεται ρητώς. Ωστόσο, τα αδρανειακά φαινόμενα δε μπορούν να συμπεριληφθούν εύκολα στη τυπική μορφή της PBE. Στην παρούσα διατριβή, χρησιμοποιείται μια προσεγγιστική έκφραση για την ταχύτητα των σωματιδίων ώστε τα αδρανειακά φαινόμενα να ενσωματωθούν σε κατά Euler περιγραφή.

Αυτή η προσέγγιση κατά Euler προσφέρει σημαντικά πλεονεκτήματα σε σχέση με τα μοντέλα δύο ρευστών που δεν αποσυνδέουν τις εξισώσεις μάζας και ορμής της σωματιδιακής φάσης. Πρώτα, η αριθμητική λύση της εξίσωσης ορμής των σωματιδίων δεν είναι απαραίτητη για τον προσδιορισμό του πεδίου ταχυτήτων των σωματιδίων, καθώς τα φαινόμενα ορμής λαμβάνονται υπόψη ως διαταραχή. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την έκφραση της ταχύτητας των σωματιδίων μέσω της ταχύτητας του ρευστού και των χωρικών παραγώγων αυτής (στη μόνιμη κατάσταση). Επιπλέον, η προσέγγιση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για σωματίδια μικρής διαμέτρου, όπου οι εξισώσεις κίνησης σε μια Lagrangian προσέγγιση γίνεται αριθμητικά δύσκολη. Τέλος, η προσέγγιση κατά Euler που διαπραγματευόμαστε στην παρούσα διατριβή είναι πιο ακριβής από την απλή Euler προσέγγιση παθητικού ιχνηλάτη εφόσον λαμβάνει υπόψη

ταυτόχρονα τη μεταφορά λόγω διάχυσης και την επίδραση της αδράνειας των σωματιδίων.

Προσπάθειες σε αυτήν την κατεύθυνση έχουν γίνει για σωματίδια μικρότερα του $1\mu m$. Οι Longest and Oldham (2008) ανέπτυξαν ένα Eulerian-Eulerian μοντέλο για την πρόβλεψη της επικάλυψης σωματιδίων σε διακλαδώσεις με στρωτή ροή για περιπτώσεις όπου η διάχυση και η αδράνεια είναι σημαντικές για την εναπόθεση. Επέκτειναν, μάλιστα, την προσέγγιση εκτροπής της ροής με διορθώσεις κοντά στο τοίχωμα ώστε να ληφθεί υπόψη η επιβράδυνση του σωματιδίου καθώς κινείται προς την επιφάνεια του τοιχώματος. Οι Xi and Longest (2008a) επέκτειναν περαιτέρω αυτό το Eulerian-Eulerian μοντέλο ώστε να αντιμετωπίζει τη διασπορά των σωματιδίων σε τυρβώδεις και μη-μόνιμες ροές, και το χρησιμοποίησαν για να προβλέψουν την επικάλυψη σε ένα ρεαλιστικό μοντέλο των τραχεοβρογχικών αεραγωγών. Πρόσθετα, οι Xi and Longest (2008b) εφάρμοσαν το μοντέλο για να υπολογίσουν την διασπορά σωματιδίων λόγω διάχυσης, αδράνειας και τύρβης σε ένα σύνθετο μοντέλο της ρινικής κοιλότητας. Αντίστοιχα, οι Zhao et al. (2009) παρουσίασαν ένα γενικευμένο μοντέλο εκτροπής της ροής για τυρβώδεις ροές υπέρλειπων σωματιδίων σε εσωτερικούς χώρους. Οι εργασίες αυτές έδιναν, επίσης, κατανομές της συγκέντρωσης και των θέσεων εναπόθεσης των σωματιδίων.

Στην παρούσα εργασία, χρησιμοποιούμε μια Eulerian-Eulerian περιγραφή μιας αραίας διασπαρμένης ροής στο όριο του χαμηλού φορτίου μάζας και μικρών λόγων όγκου. Θεωρούμε μονόπλευρη σύζευξη της σωματιδιακής φάσης, σύμφωνα με την οποία η σωματιδιακή φάση επηρεάζεται από τη συνεχή φάση, αλλά το αντίστροφο δεν ισχύει. Στην Eulerian περιγραφή της σωματιδιακής φάσης, προσεγγίζουμε την ταχύτητα των σωματιδίων στην εξίσωση μάζας των σωματιδίων, ή ισοδύναμα στην PBE, με μια έκφραση στο όριο των μικρών χρόνων χαλάρωσης των σωματιδίων. Συγκεκριμένα, η ταχύτητα των σωματιδίων αποτελείται από έναν όρο διάχυσης, ο οποίος εξαρτάται από την χωρική παράγωγο της συγκέντρωσης των σωματιδίων, και από έναν όρο συναγωγής που είναι ανεξάρτητος της συγκέντρωσης. Η ταχύτητα συναγωγής ισούται με την ταχύτητα του ρευστού διορθωμένη κατά την ταχύτητα εκτροπής (ή ολίσθησης) εξαιτίας της αδράνειας και της βαρυτικής καθίζησης ή άλλων εξωτερικών δυνάμεων, εισάγοντας με αυτόν τον τρόπο τα αδρανειακά φαινόμενα στην Eulerian μορφή της PBE. Η ισχύς της προσέγγισης της ταχύτητας των σωματιδίων για μεγαλύτερους χρόνους χαλάρωσης είναι πρωταρχικής σημασίας για τον προσδιορισμό του εύρους εφαρμογής της.

Η τροποποιημένη εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων (particle transport equation - PTE), δηλαδή η PBE χωρίς την επίδραση της πυρηνοποίησης, της υγροσκοπικής ανάπτυξης και της συσσωμάτωσης, επιλύεται αριθμητικά στις τρεις διαστάσεις χρησιμοποιώντας CFD τεχνικές. Η συγκέντρωση των σωματιδίων υπολογίζεται επιβάλλοντας τη συνήθη συνοριακή συνθήκη του πλήρως απορροφητικού τοιχώματος (μηδενική συγκέντρωση σωματιδίων στο τοίχωμα) σε συνδυασμό με την ισχυρή ροή μεταφοράς σωματιδίων προς το τοίχωμα εξαιτίας της επίδρασης των μαζικών δυνάμεων.

Εξ'όσων γνωρίζουμε, αυτή είναι η πρώτη φορά που χρησιμοποιείται μια περιγραφή κατά Euler της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων για την πρόβλεψη της μεταφοράς και εναπόθεσης βαρέων, αδρανών σωματιδίων. Όπως φαίνεται από τις διάφορες πρακτικές εφαρμογές που εξετάσαμε, με κατάλληλη χρήση και περαιτέρω ανάλυση των αριθμητικών προβλέψεων το μοντέλο μπορεί να συνεισφέρει στην κατανόηση της συμπεριφοράς των σωματιδίων στο αναπνευστικό και καρδιαγγειακό σύστημα, προσφέροντας με αυτόν τον τρόπο βαθύτερη κατανόηση της φυσικής και

λειτουργώντας ως εργαλείο για το σχεδιασμό και τη βελτιστοποίηση βιοϊατρικών εφαρμογών.

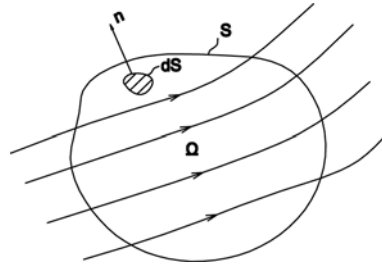
Η δομή της διατριβής είναι η ακόλουθη:

- Στο Κεφάλαιο 2 δίδεται το θεωρητικό υπόβαθρο σχετικά με τις ροές ρευστού-σωματιδίων και περιγράφονται τα αριθμητικά μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν. Συγκεκριμένα για τη σωματιδιακή φάση, περιγράφεται λεπτομερώς ο τρόπος με τον οποίο τα αδρανειακά φαινόμενα ενσωματώθηκαν στην περιγραφή κατά Euler της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων.
- Η πιστοποίηση της προτεινόμενης μεθοδολογίας δίνεται στο Κεφάλαιο 3. Οι όροι της διάχυσης και των εξωτερικών δυνάμεων πιστοποιούνται ξεχωριστά, πριν την πιστοποίηση του συνολικού μοντέλου. Τα αποτελέσματα του κατά Euler μοντέλου συγκρίνονται με τα ευρήματα διαφόρων πειραματικών, αναλυτικών και αριθμητικών εργασιών της βιβλιογραφίας.
- Στα Κεφάλαια 4 και 5, το αναπτυχθέν μοντέλο χρησιμοποιείται για τη μελέτη της επίδρασης της αδράνειας αερολύματος για ροές σε δύο βασικές γεωμετρίες, οι οποίες ωστόσο αποτελούν δομικά στοιχεία του αναπνευστικού συστήματος: σε μια γωνιά 90° και σε μια διακλάδωση. Συγκεκριμένα, εξετάζονται η επίδραση του μεγέθους των σωματιδίων και των χαρακτηριστικών του πεδίου ροής. Υπολογίζονται τα κλάσματα εναπόθεσης και οι κατανομές συγκέντρωσης και υποδεικνύονται οι θέσεις εναπόθεσης των σωματιδίων.
- Στο Κεφάλαιο 6, το μοντέλο κατά Euler χρησιμοποιείται για τη μελέτη της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων, τα οποία είναι διεσπαρμένα σε υγρό μέσο, και βρίσκονται υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.
- Τέλος, στο Κεφάλαιο 7, συνοψίζονται τα βασικότερα ευρήματα της διατριβής και προτείνονται κατευθύνσεις για τη περαιτέρω ανάπτυξη της προτεινόμενης μεθοδολογίας.

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφεται το θεωρητικό υπόβαθρο σχετικά με τα συστήματα ρευστού-σωματιδίων και τα αριθμητικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται στην παρούσα διατριβή.

2.1 ΣΥΝΕΧΗΣ ΦΑΣΗ

2.1.1 Συνεχής Φάση:Εξισώσεις



Εικόνα 2.1: Γενικευμένος πεπερασμένος υπολογιστικός όγκος.

Έστω S μια κλειστή επιφάνεια που περικλείει έναν όγκο Ω τυχαίου σχήματος σε μια πεπερασμένη περιοχή της ροής του ρευστού, σταθερή στον χώρο μέσα από την οποία διέρχεται το ρευστό, όπως φαίνεται στην Εικ.2.1. Η ολοκληρωματική μορφή της εξίσωσης συνέχειας ενός ασυμπίεστου ρευστού γράφεται ως:

$$\int_S \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0, \quad (2.1)$$

και οι τριδιάστατες εξισώσεις ορμής ως:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho_f u d\Omega + \int_S \rho_f u \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{i} \cdot d\vec{S} + \int_S (\tau_{xx} \hat{i} + \tau_{yx} \hat{j} + \tau_{zx} \hat{k}) \cdot d\vec{S} \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho_f v d\Omega + \int_S \rho_f v \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{j} \cdot d\vec{S} + \int_S (\tau_{xy} \hat{i} + \tau_{yy} \hat{j} + \tau_{zy} \hat{k}) \cdot d\vec{S} \quad .(2.2) \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho_f w d\Omega + \int_S \rho_f w \vec{v} \cdot d\vec{S} &= - \int_S p \hat{k} \cdot d\vec{S} + \int_S (\tau_{xz} \hat{i} + \tau_{yz} \hat{j} + \tau_{zz} \hat{k}) \cdot d\vec{S} \end{aligned}$$

Στις παραπάνω εξισώσεις $\vec{v} = u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}$ είναι η ταχύτητα του ρευστού, p η πίεση, ρ_f η πυκνότητα του ρευστού, τ_{ij} οι συνιστώσες του τανυστή των τάσεων, $d\vec{S} = \hat{n}dS$ η στοιχειώδης επιφάνεια όπου \hat{n} το κάθετο σε αυτήν μοναδιαίο διάνυσμα, $d\Omega$ ο στοιχειώδης όγκος, και $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ τα διανύσματα βάσης του Cartesian χώρου. Οι εξισώσεις αυτές αποτελούν τις εξισώσεις Navier-Stokes για ένα ασυμπίεστο, Νευτώνειο ρευστό σε ολοκληρωματική μορφή. Στην παρούσα εργασία, εξετάζονται μόνιμες ροές, οπότε ο πρώτος όρος στο αριστερό μέλος των Εξ.(2.2) ισούται με το μηδέν, με αποτέλεσμα την περαιτέρω απλοποίηση των εξισώσεων.

Αν u_0 και ℓ είναι η χαρακτηριστική ταχύτητα και το χαρακτηριστικό μήκος, αντίστοιχα, για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα ροής, τότε η μόνιμη, αδιάστατη μορφή των Εξ.(2.2) γράφεται (τα ίδια σύμβολα κρατούνται για ευκολία):

$$\begin{aligned} \int_S u \bar{v} \cdot d\bar{S} &= - \int_S p \hat{i} \cdot d\bar{S} + \frac{1}{\text{Re}_S} \int_S (\tau_{xx} \hat{i} + \tau_{yx} \hat{j} + \tau_{zx} \hat{k}) \cdot d\bar{S} \\ \int_S v \bar{v} \cdot d\bar{S} &= - \int_S p \hat{j} \cdot d\bar{S} + \frac{1}{\text{Re}_S} \int_S (\tau_{xy} \hat{i} + \tau_{yy} \hat{j} + \tau_{zy} \hat{k}) \cdot d\bar{S}, \quad (2.3) \\ \int_S w \bar{v} \cdot d\bar{S} &= - \int_S p \hat{k} \cdot d\bar{S} + \frac{1}{\text{Re}_S} \int_S (\tau_{xz} \hat{i} + \tau_{yz} \hat{j} + \tau_{zz} \hat{k}) \cdot d\bar{S} \end{aligned}$$

χρησιμοποιώντας τα μεγέθη $\rho_f u_o^2$ και u_o / ℓ για την αδιαστατοποίηση των όρων της πίεσης και των διατμητικών τάσεων, αντίστοιχα. Στις Εξ.(2.3), Re είναι ο αριθμός Reynolds της ροής, που ορίζεται ως:

$$\text{Re} = \frac{\rho_f u_o \ell}{\mu_f}, \quad (2.4)$$

όπου μ_f η δυναμική συνεκτικότητα του ρευστού. Ο αριθμός Reynolds δίνει τον λόγο των δυνάμεων αδράνειας προς τις δυνάμεις συνεκτικότητας μέσα στη ροή.

Σημειώνεται ότι στην παρούσα εργασία, ως χαρακτηριστική ταχύτητα χρησιμοποιείται η μέση ταχύτητα εισόδου του ρευστού, ενώ ως χαρακτηριστικό μήκος η διάμετρος του αγωγού.

2.1.2 Συνεχής Φάση: Αριθμητική Επίλυση

Οι εξισώσεις Navier-Stokes για τριδιάστατο, ασυμπίεστο πεδίο ροής του φέροντος ρευστού, επιλύονται αριθμητικά με χρήση του μη-εμπορικού CFD κώδικα CADBA (Computational Algorithm for Diagnosis of Biofluid flow Abnormalities). Ο κώδικας βασίζεται στη μεθοδολογία που προτείνουν οι Ferziger and Perić (2002) και αναπτύχθηκε από τους Neofytou (2005) και Neofytou and Tsangaris (2006). Ο κώδικας έχει ποσοποιηθεί για διάφορες συνθήκες ροής και τα βασικά του χαρακτηριστικά συνοψίζονται στη συνέχεια.

Ο κώδικας ενσωματώνει τη μεθοδολογία πεπερασμένων όγκων σε multi-block, σωματόδετα (body-fitted) πλέγματα, όπου λαμβάνεται υπόψη η μη-ορθογωνιότητα του πλέγματος. Εκτός από Νευτώνεια, ο κώδικας περιέχει γενικευμένα Νευτώνεια και ιξωδοελαστικά (Oldroyd-B) μοντέλα ρευστού. Για να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα της πίεσης και να διασφαλιστεί ότι το υπολογιζόμενο πεδίο ροής ικανοποιεί την εξίσωση συνέχειας, χρησιμοποιείται στον κώδικα μια εξίσωση διόρθωσης πίεσης μαζί με τη μεθοδολογία SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, Patankar (1980)). Η SIMPLE είναι μια επαναληπτική μέθοδος για συζευγμένα προβλήματα ταχύτητας-πίεσης. Ξεκινώντας από μια αρχική υπόθεση για το πεδίο ροής, οι εξισώσεις Navier-Stokes επιλύονται για την εύρεση της ταχύτητας, κατόπιν η πίεση διορθώνεται χρησιμοποιώντας την εξίσωση διόρθωσης πίεσης και οι ταχύτητες ενημερώνονται. Αυτά τα νέα πεδία ταχύτητας και πίεσης ικανοποιούν την εξίσωση συνέχειας, αλλά όχι απαραίτητα και τις εξισώσεις ορμής. Επομένως, η διαδικασία επαναλαμβάνεται με το αναθεωρημένο πεδίο ταχυτήτων, μέχρι η λύση του πεδίου ροής (ταχύτητες και πίεση) να ικανοποιεί ταυτόχρονα την εξίσωση συνέχειας και τις εξισώσεις ορμής.

Οι εξισώσεις ορμής (Εξ.(2.3)) διακριτοποιούνται στο CADBA μέσω εμπρός (πρόσω) Euler σχήμα για τον χρονικά μεταβαλλόμενο όρο, με το 3^{ης} τάξης σχήμα QUICK για τον όρο συναγωγής, και με το 2^{ης} τάξης σχήμα κεντρικών διαφορών (central difference scheme - CDS) για τον όρο διάχυσης (όροι συνεκτικότητας), ενώ ο όρος της πίεσης αντιμετωπίζεται ως πηγή (Ferziger and Perić, 2002). Το σύστημα γραμμικών εξισώσεων

που προκύπτει επιλύεται αριθμητικά με την επαναληπτική μέθοδο SIP (Strongly Implicit Procedure), μια μέθοδο ατελούς LU παραγοντοποίησης που προτάθηκε από τον Stone (1968).

Στην παρούσα εργασία, επιλύουμε το πεδίο ροής θεωρώντας ασυμπιεστο, Νευτώνειο ρευστό, στρωτή ροή, σταθερές ιδιότητες ρευστού και μονή σύζευξη, δηλαδή ότι η επίδραση της σωματιδιακής φάσης στο υδροδυναμικό πεδίο του φέροντος αερίου είναι αμελητέα. Επιπλέον, στην είσοδο θεωρούμε σταθερό προφίλ ταχύτητας και σταθερή πίεση και στα τοιχώματα εφαρμόζεται η συνθήκη μη-ολίσθησης, ενώ στην έξοδο τόσο οι ταχύτητες, όσο και η πίεση βρίσκονται με extrapolation από τις τιμές των γειτονικών εσωτερικών κόμβων. Η κατανομή της ταχύτητας στην είσοδο είναι αυτή της πλήρως ανεπτυγμένης ροής σε ευθύγραμμο κυκλικό αγωγό, η οποία για Νευτώνειες ροές βρίσκεται αναλυτικά. Στην περίπτωση αυτή, το (παραβολικό) προφίλ ταχύτητας δίνεται σε αδιάστατη μορφή από την ακόλουθη σχέση:

$$v|_{inlet} = 2 \left[1 - \left(\frac{r}{r_t} \right)^2 \right], 0 \leq r \leq r_t, \quad (2.5)$$

όπου $r_t = d_t / 2$ η ακτίνα του αγωγού.

2.2 ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗ ΦΑΣΗ

2.2.1 Σωματιδιακή Φάση: Γενική Δυναμική Εξίσωση

Η μεταβολή στο χώρο και το χρόνο της κατανομής μεγέθους σωματιδίων κάτω από διάφορες φυσικές διεργασίες είναι υψίστης σημασίας για τη μελέτη της ροής των αερολυμάτων. Υπάρχουν δύο κατηγορίες διαδικασιών που μπορούν να μεταβάλουν την κατανομή μεγέθους του αερολύματος σε ένα σταθερό στοιχειώδη όγκο: α) οι εσωτερικές διαδικασίες, όπως η συσσωμάτωση/συνάθροιση και η μετατροπή αέριας φάσης σε σωματιδιακή, και β) οι εξωτερικές διαδικασίες, όπως η συναγωγή και η διάχυση που οφείλεται στην ύπαρξη κλίσεων συγκέντρωσης, καθώς και στην επίδραση εξωτερικών δυνάμεων (π.χ. βαρύτητας, ηλεκτρομαγνητικής). Η διαφορική-ολοκληρωτική εξίσωση που περιγράφει την επίδραση αυτών των φαινομένων στην κατανομή μεγέθους σωματιδίων ονομάζεται Γενική Δυναμική Εξίσωση (General Dynamic Equation - GDE). Δοθέντων κατάλληλων αρχικών και συνοριακών συνθηκών, η GDE περιγράφει πλήρως την κατανομή μεγέθους των σωματιδίων σε μια ροή αερολύματος.

Εντός ροής, η GDE δίνεται από τη σχέση (Drossinos and Housiadas, 2006):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \vec{v}_p) = \frac{\partial n}{\partial t} \Big|_{g-p} + \frac{\partial n}{\partial t} \Big|_{c-a}, \quad (2.6)$$

όπου $n(v; \vec{r}, t)$ είναι η συγκέντρωση σωματιδίων κατά αριθμό με όγκο μεταξύ v και $v + dv$, και \vec{v}_p η μέση ταχύτητα των σωματιδίων. Ο όγκος των σωματιδίων, v , επιλέγεται ως ανεξάρτητη μεταβλητή στην κατανομή μεγέθους των σωματιδίων, n , έναντι της διαμέτρου τους, d_p , επειδή διατηρείται κατά τη συσσωμάτωση/συνάθροιση. Η έκφραση αυτή της κατανομής μεγέθους των σωματιδίων είναι κατάλληλη για σφαιρικά σωματίδια ενός είδους, τα οποία χρησιμοποιούνται στην παρούσα εργασία.

Στην Εξ.(2.6), ο πρώτος όρος στο αριστερό μέλος αναφέρεται στην χρονική συσσώρευση σωματιδίων και ο δεύτερος στη μεταφορά των σωματιδίων εξαιτίας των εξωτερικών διαδικασιών, ενώ το δεξιό μέλος αντιπροσωπεύει τις εσωτερικές διεργασίες (ο

πρώτος όρος τη μετατροπή αέριας φάσης σε σωματιδιακή και ο δεύτερος τη συσσωμάτωση/συνάθροιση). Καθώς οι εσωτερικές διαδικασίες δε λαμβάνονται υπόψη στην παρούσα διατριβή, οι μηχανισμοί αυτοί δεν εξετάζονται περαιτέρω. Εκτενείς αναλύσεις των διαφόρων εσωτερικών διαδικασιών μπορεί κανείς να βρει στις εργασίες των Friedlander (2000), Hinds (1999), Seinfeld and Pandis (1998) και Drossinos and Housiadas (2006).

Οι εξωτερικές διαδικασίες είναι εκείνες, οι οποίες μεταβάλλουν την κατανομή μεγέθους των σωματιδίων, $n(v; \vec{r}, t)$, εξαιτίας της μεταφοράς σωματιδίων διαμέσου των ορίων του στοιχειώδους όγκου που εξετάζεται. Διάφορα φαινόμενα επηρεάζουν την κίνηση ενός σωματιδίου που βρίσκεται μέσα σε ένα ρευστό, είτε το ρευστό είναι στάσιμο είτε κινείται. Οι μηχανισμοί που οδηγούν την κίνηση των σωματιδίων μπορούν να προκαλέσουν τη μεταφορά τους μέσα στο ρευστό, τόσο διαμέσου των ορίων του στοιχειώδους όγκου, όσο και προς μια επιφάνεια όπου μπορούν να εναποτεθούν. Για το λόγο αυτό, οι μηχανισμοί αυτοί καλούνται συχνά ως μηχανισμοί εναπόθεσης. Στις ενότητες που ακολουθούν, περιγράφονται βασικοί μηχανισμοί εναπόθεσης και θα δείξουμε πως αυτοί ενσωματώνονται στη GDE για να ληφθεί υπόψη η μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε ροές ρευστού-σωματιδίων.

2.2.2 Σωματιδιακή Φάση: Μηχανισμοί εναπόθεσης

Ας θεωρήσουμε την κίνηση ενός σωματιδίου διαμέτρου d_p , σε ένα συνεκτικό ρευστό. Η δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο καθώς αυτό κινείται στο ρευστό, καλείται αντίσταση, \vec{F}_D . Η κατεύθυνση της δύναμης αυτής είναι αυτή της σχετικής ταχύτητας μεταξύ του ρευστού και του σωματιδίου, $\vec{v} - \vec{v}_p$, και το μέτρο της δίνεται από τη γενική μορφή της εξίσωσης αντίστασης του Newton (Hinds, 1999):

$$F_D = C_D \frac{\pi}{8} \rho_f d_p^2 |\vec{v} - \vec{v}_p|^2. \quad (2.7)$$

Στην προηγούμενη εξίσωση, C_D , είναι μια αδιάστατη ποσότητα που ονομάζεται συντελεστής αντίστασης, και είναι συνάρτηση του σωματιδιακού αριθμού Reynolds:

$$Re_p = \frac{\rho_f d_p |\vec{v} - \vec{v}_p|}{\mu_f}. \quad (2.8)$$

Σε αναλογία με τον αριθμό Reynolds της ροής (Εξ.(2.4)), ο Re_p δίνει το λόγο των αδρανειακών δυνάμεων προς τις δυνάμεις συνεκτικότητας που ασκούνται στο σωματίδιο. Όταν οι αδρανειακές δυνάμεις καθορίζουν την κίνηση του σωματιδίου, δηλαδή για $1000 < Re_p < 2 \times 10^5$, ο συντελεστής αντίστασης είναι σταθερός ίσος προς $C_D = 0.44$ (περιοχή νόμου Newton). Ωστόσο, για $Re_p < 1000$, ο συντελεστής αντίστασης εξαρτάται από τον αριθμό Reynolds των σωματιδίων, δηλαδή $C_D = f(Re_p)$. Για $1 < Re_p < 1000$, η ακόλουθη σχέση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον συντελεστή αντίστασης (Hinds, 1999; Seinfeld and Pandis, 1998):

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}). \quad (2.9)$$

Στις περιπτώσεις, όπου οι αδρανειακές δυνάμεις είναι αμελητέες συγκρινόμενες με τις δυνάμεις συνεκτικότητας, ο Stokes (1851) έδειξε ότι η αντίσταση που ασκείται στο σωματίδιο από το ρευστό ισούται με:

$$F_D = 3\pi \mu_f d_p |\vec{v} - \vec{v}_p|. \quad (2.10)$$

Επομένως, ο συντελεστής αντίστασης είναι ίσος προς:

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_p}, \quad (2.11)$$

δηλαδή είναι αντιστρόφως ανάλογος του σωματιδιακού αριθμού Reynolds. Η Εξ.(2.10) είναι γνωστή ως ο νόμος του Stokes. Για να είναι αμελητέες οι αδρανειακές δυνάμεις σε σχέση με αυτές της συνεκτικότητας, θα πρέπει η ροή να είναι στρωτή και οι σωματιδιακοί αριθμοί Reynolds χαμηλοί. Αυτό συμβαίνει στις περισσότερες περιπτώσεις αερολυμάτων, συμπεριλαμβανομένων και αυτών της παρούσας εργασίας, όπου το μέγεθος των σωματιδίων είναι μικρό και ταχύτητες ροής χαμηλές.

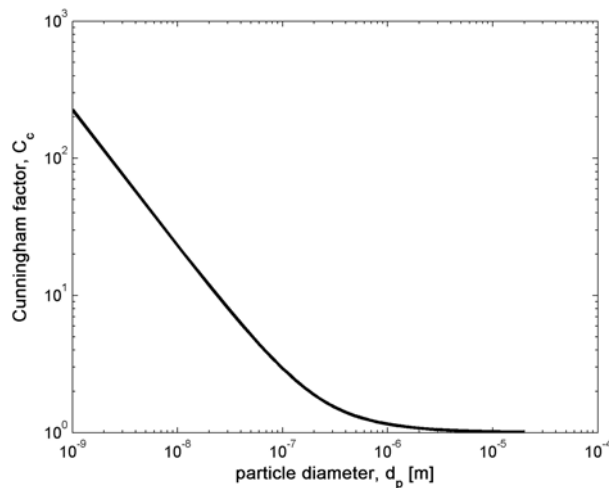
Ο νόμος του Stokes (Εξ.(2.10)) ισχύει μόνο όταν το ρευστό μπορεί να θεωρηθεί ως συνεχές μέσο. Καθώς το μέγεθος των σωματιδίων μειώνεται και πλησιάζει τη μέση ελευθέρα διαδρομή του αερίου, η σχετική ταχύτητα στην επιφάνεια του σωματιδίου δεν είναι πλέον μηδενική και τα στοιχεία του αερίου ολισθαίνουν στην επιφάνεια του σωματιδίου, με αποτέλεσμα μειωμένη αντίσταση. Για να αντιμετωπιστεί το θέμα αυτό, εισάγεται ένας συντελεστής διόρθωσης στο νόμο του Stokes, ο οποίος τώρα γράφεται ως:

$$F_D = \frac{3\pi \mu_f d_p |\vec{v} - \vec{v}_p|}{C_c}. \quad (2.12)$$

Ο συντελεστής διόρθωσης δίνεται από τη σχέση (Hinds, 1999):

$$C_c = 1 + \frac{\lambda}{d_p} \left[2.34 + 1.05 \exp\left(-0.39 \frac{\lambda}{d_p}\right) \right], \quad (2.13)$$

και ονομάζεται συντελεστής ολίσθησης ή συντελεστής Cunningham. Η Εξ.(2.13), δείχνει ότι $C_c \geq 1$, πάντα. Στην Εικ.2.2, δίνεται ο συντελεστής Cunningham συναρτήσει της διαμέτρου των σωματιδίων d_p , για σφαιρικά σωματίδια πυκνότητας $\rho_p = 1000 \text{kg/m}^3$, διασκορπισμένα σε αέρα ($p = 101 \text{kPa}$, $T = 293 \text{K}$).



Εικόνα 2.2: Συντελεστής Cunningham για σφαιρικά σωματίδια, πυκνότητας $\rho_p=1000 \text{kg/m}^3$, διασκορπισμένα σε αέρα ($p=101 \text{kPa}$, $T=293 \text{K}$).

Διάχυση

Τα σωματίδια των αερολυμάτων συγκρούονται συνεχώς με τα μόρια του φέροντος αερίου, με αποτέλεσμα να κινούνται τυχαία. Η κίνηση αυτή ονομάζεται κίνηση Brown.

Μακροσκοπικά, η κίνηση αυτή εκδηλώνεται με ροή σωματιδίων από περιοχές υψηλής συγκέντρωσης σωματιδίων σε περιοχές χαμηλής συγκέντρωσης, η οποία είναι γνωστή ως διάχυση και περιγράφεται από το νόμο του Fick. Δηλαδή, αν \vec{J}_p είναι η ροή και D ο συντελεστής διάχυσης των σωματιδίων, τότε:

$$\vec{J}_p = -D \nabla n. \quad (2.14)$$

Ο συντελεστής διάχυσης των σωματιδίων δίνεται από την εξίσωση Stokes-Einstein διορθωμένη από το συντελεστή Cunningham:

$$D = \frac{k_B T_f C_c}{3\pi \mu_f d_p}, \quad (2.15)$$

όπου $k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ είναι η σταθερά Boltzmann, και T_f η θερμοκρασία του ρευστού. Ο συντελεστής διάχυσης εξαρτάται τόσο από τις ιδιότητες του ρευστού όσο και από το μέγεθος του σωματιδίου. Από την Εξ. (2.15) είναι φανερό ότι η διάχυση γίνεται σημαντική καθώς το μέγεθος των σωματιδίων μειώνεται.

Βαρυτική Καθίζηση

Η ταχύτητα που αποκτά ένα σωματίδιο εξαιτίας της επίδρασης της βαρύτητας ισούται με (Drossinos and Housiadas, 2006):

$$\vec{v}_s = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \vec{g}, \quad (2.16)$$

όπου \vec{g} η επιτάχυνση της βαρύτητας, και ο αντίστοιχος μηχανισμός εναπόθεσης ονομάζεται βαρυτική καθίζηση. Στην πλειοψηφία των αερολυμάτων, ισχύει ότι $\rho_f \ll \rho_p$, και αν ληφθεί υπόψη και ο συντελεστής ολίσθησης, τότε η Εξ.(2.16) γίνεται:

$$\vec{v}_s = \frac{\rho_p d_p^2 C_c}{18\mu_f} \vec{g}. \quad (2.17)$$

Η ταχύτητα καθίζησης αυξάνει γρήγορα με αύξηση του μεγέθους των σωματιδίων, καθώς είναι ανάλογη του τετραγώνου της διαμέτρου των σωματιδίων.

Αδρανειακή Πρόσκρουση

Η αδρανειακή πρόσκρουση είναι σημαντικός μηχανισμός επικάθισης, παρών σε πολλές βιομηχανικές (π.χ. κατανομές μεγέθους, φίλτρα) και βιολογικές (εναπόθεση στο αναπνευστικό σύστημα) εφαρμογές. Τα αιωρούμενα σωματίδια δεν ακολουθούν πάντα τις γραμμές ροής του επιταχυνόμενου ρευστού, εξαιτίας της δικής τους αδράνειας, με αποτέλεσμα να προσκρούουν και να επικάθονται στις γειτονικές επιφάνειες.

Μια παράμετρος που χαρακτηρίζει την απόκριση των σωματιδίων στις αλλαγές της ροής του ρευστού είναι ο χρόνος χαλάρωσης του σωματιδίου, τ_p , ο οποίος ορίζεται ως ο χρόνος που χρειάζεται ένα σωματίδιο διαμέτρου d_p και πυκνότητας ρ_p , να αποκτήσει την τελική του ταχύτητα αν αφεθεί σε ακίνητο ρευστό ιξώδους μ_f . Αυτές οι ποσότητες σχετίζονται μέσω (Drossinos and Housiadas, 2006):

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2 C_c}{18\mu_f}, \quad (2.18)$$

δηλαδή ο χρόνος χαλάρωσης του σωματιδίου είναι συνάρτηση των ιδιοτήτων του ρευστού, μέσω του ιξώδους και του συντελεστή Cunningham, καθώς και αυτών του σωματιδίου (πυκνότητα και διάμετρος). Αντικατάσταση, στην Εξ.(2.17), δείχνει ότι

$\vec{v}_s = \tau_p \vec{g}$. Ανάλογα, η ταχύτητα \vec{v}_p που αποκτά ένα σωματίδιο που υπόκειται σε δύναμη \vec{F} , δίνεται από τη σχέση:

$$\vec{v}_p = \tau_p \frac{\vec{F}}{m_p}, \quad (2.19)$$

όπου m_p η μάζα ενός σωματιδίου.

Ένας πολύ χρήσιμος αδιάστατος αριθμός που χρησιμοποιείται στη μελέτη των αδρανειακών φαινομένων των σωματιδίων είναι ο αριθμός Stokes, ο οποίος ορίζεται ως ο λόγος του χρόνου χαλάρωσης του σωματιδίου προς το χαρακτηριστικό χρόνο της ροής:

$$St = \frac{\tau_p}{\ell / v_o} = \frac{\rho_p d_p^2 C_c v_o}{18 \mu_f \ell}. \quad (2.20)$$

Ο αριθμός Stokes αποτελεί κριτήριο που χρησιμοποιείται για να χαρακτηρίσει το πόσο εύκολα ένα σωματίδιο προσαρμόζεται σε αλλαγές στη ροή του ρευστού: $St \ll 1$ υποδηλώνει ότι το σωματίδιο ακολουθεί τις γραμμές ροής του ρευστού, για αυτό η πρόσκρουση δεν είναι σημαντικός μηχανισμός εναπόθεσης για τα σωματίδια αυτά, ενώ $St > 1$ υποδηλώνει ότι τα σωματίδια αποκλίνουν από τις γραμμές ροής και προσκρούουν σε παρακείμενες επιφάνειες.

Από τις Εξ.(2.18) και (2.20) είναι προφανές ότι όσο μεγαλύτερο το σωματίδιο, τόσο σημαντικότερα τα αδρανειακά φαινόμενα. Έχει βρεθεί εμπειρικά ότι η πρόσκρουση πρέπει πάντα να λαμβάνεται υπόψη ως μηχανισμός εναπόθεσης για σωματίδια με διάμετρο μεγαλύτερη του $1 \mu m$.

2.2.3 Σωματιδιακή Φάση: Μεταφορά και Εναπόθεση Σωματιδίων

Θεωρούμε ένα μονοδισπαρμένο πληθυσμό σφαιρικών σωματιδίων, το καθένα διαμέτρου d_p και μάζας m_p , τα οποία αιωρούνται διασκορπισμένα σε ασυμπίεστο κινούμενο ρευστό. Αν αγνοήσουμε τις εσωτερικές διαδικασίες (το μέγεθος και ο αριθμός των σωματιδίων παραμένουν σταθερά), τότε την χρονική στιγμή t στην θέση \vec{r} η συγκέντρωση κατά αριθμό των σωματιδίων θα είναι $n(\vec{r}, t)$. Η GDE (Εξ.(2.6)), γράφεται τότε:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \vec{v}_p) = 0, \quad (2.21)$$

όπου υπενθυμίζεται ότι $\vec{v}_p(\vec{r}, t)$ είναι η ταχύτητα των σωματιδίων. Για να διαχωρίζουμε την παραπάνω εξίσωση που αμελεί τις εσωτερικές διαδικασίες του αερολύματος από την GDE, από δω και στο εξής θα αναφερόμαστε σε αυτήν ως εξίσωση μεταφοράς πληθυσμού σωματιδίων (particle population transport equation - PTE). Είναι προφανές ότι η PTE μπορεί να επιλυθεί για την εύρεση της συγκέντρωσης των σωματιδίων αν η ταχύτητάς τους είναι γνωστή.

Υιοθετώντας μια μεθοδολογία δύο ρευστών για το σύστημα ρευστού-σωματιδίων, θα δείξουμε πως μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση ταχύτητα των σωματιδίων, \vec{v}_p , χωρίς την επίλυση της μέσης εξίσωσης διατήρησης ορμής των σωματιδίων.

Τα σωματίδια είναι διασκορπισμένα εντός συνεχούς μέσου (ρευστό). Όταν η σωματιδιακή φάση είναι αρκετά αραιή, μπορούμε να υποθέσουμε ότι τα σωματίδια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Ωστόσο, αλληλεπιδρούν με το φέρον ρευστό και με

εξωτερικά δυναμικά πεδία, αν αυτά είναι παρόντα. Επομένως, αν $\vec{F}_f(\vec{r}, t)$ η δύναμη ανα μονάδα μάζας που ασκείται στα σωματίδια από το ρευστό και $\vec{F}_{ext}(\vec{r}, t)$ αυτή που ασκείται από τις εξωτερικές δυνάμεις, τότε η εξίσωση συνέχειας για τη σωματιδιακή φάση είναι:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \vec{v}_p) = 0, \quad (2.22)$$

και η αντίστοιχη μέση εξίσωση ορμής:

$$\frac{\partial \vec{v}_p}{\partial t} + \vec{v}_p \cdot \nabla \vec{v}_p = \frac{1}{c} \nabla \cdot \Pi_p + \vec{F}_f + \vec{F}_{ext}, \quad (2.23)$$

όπου $c(\vec{r}, t) = m_p n(\vec{r}, t)$ η συγκέντρωση μάζας των σωματιδίων και Π_p ο τανυστής τάσης των σωματιδίων.

Εφόσον τα σωματίδια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, η σωματιδιακή φάση μπορεί να θεωρηθεί ως ιδανικό αέριο, η τοπική θερμοκρασία του οποίου ισούται με αυτήν του ρευστού, $T_f(\vec{r}, t)$, και υπόκεινται σε μια δύναμη $\vec{F}_f + \vec{F}_{ext}$. Αν, επιπρόσθετα, οι συνεκτικές δυνάμεις στα σωματίδια θεωρηθούν αμελητέες, τότε ο τανυστής τάσης των σωματιδίων γράφεται ως:

$$\Pi_p = -I p_p, \quad (2.24)$$

όπου η μερική τάση της σωματιδιακής φάσης, p_p , δίνεται από το νόμο των ιδανικών αερίων:

$$p_p(\vec{r}, t) = n(\vec{r}, t) k_B T_f(\vec{r}, t) = \frac{k_B}{m_p} c(\vec{r}, t) T_f(\vec{r}, t). \quad (2.25)$$

Ο όρος της πίεσης στην εξίσωση ορμής (Εξ.(2.23)) γράφεται λοιπόν:

$$\frac{1}{c} \nabla \cdot \Pi_p = \frac{1}{c} \nabla \cdot (-I p_p) = -\frac{1}{c} \nabla \cdot \left(\frac{k_B T_f}{m_p} c \right). \quad (2.26)$$

Στην πλειοψηφία των βιολογικών ροών, όπως αυτές που μας ενδιαφέρουν στο παρόν, είναι λογικό να υποθέσουμε σταθερή θερμοκρασία, δηλαδή ισόθερμη ροή, όποτε η Εξ.(2.26) απλοποιείται στην:

$$\frac{1}{c} \nabla \cdot \Pi_p = -\frac{k_B T_f}{m_p} \frac{1}{c} \nabla c = -\frac{k_B T_f}{m_p} \nabla \ln c. \quad (2.27)$$

Σύμφωνα με τον Ramshaw (1979), μια γενική έκφραση για τη δύναμη που ασκείται στα σωματίδια από το ρευστό, $\vec{F}_f(\vec{r}, t)$, στην περίπτωση Brownian σωματιδίων είναι:

$$\vec{F}_f(\vec{r}, t) = \beta_p (\bar{v} - \vec{v}_p) - (1/\rho_p) \nabla p - (\eta/m) \nabla \ln T_f + \vec{F}_v(\vec{r}, t) + \vec{F}_B(\vec{r}, t), \quad (2.28)$$

όπου $\beta_p = 1/\tau_p$ ο αντίστροφος χρόνος χαλάρωσης των σωματιδίων, $p(\vec{r}, t)$ η πίεση του συστήματος ρευστού-σωματιδίων, η ο θερμικός συντελεστής διάχυσης. Οι δύο τελευταίοι όροι στο δεξί μέλος της Εξ.(2.28) αντιπροσωπεύουν τη δύναμη λόγω εικονικής μάζας (virtual mass force) και τη δύναμη Basset-Bousinesq, αντίστοιχα, οι οποίες είναι χρονικά μεταβαλλόμενες δυνάμεις εξαιτίας της επιτάχυνσης των σωματιδίων μέσα στο ρευστό. Στην παρούσα εργασία οι μη-μονιμες αυτές δε λαμβάνονται υπόψη και δεν θα αναλυθούν περαιτέρω.

Ο δεύτερος όρος της Εξ.(2.28) αναφέρεται στη δύναμη που ασκείται στα σωματίδια εξαιτίας της κλίσης της πίεσης στην περιοχή γύρω από αυτά. Η δύναμη είναι σημαντική όταν υπάρχουν μεγάλες χωρικές παράγωγοι πίεσης στη ροή και η πυκνότητα των σωματιδίων είναι μικρότερη ή ίση αυτής του ρευστού. Επομένως, για τις περιπτώσεις

που εξετάζονται στο παρόν, όπου $\rho_p \gg \rho_f$, η συνεισφορά της δύναμης αυτής δεν είναι σημαντική.

Τέλος η υπόθεση της ισόθερμης ροής για τις βιολογικές ροές, σημαίνει ότι και όρος της θερμοφορίας στην Εξ.(2.28) εξαφανίζεται.

Παίρνοντας όλες αυτές τις παρατηρήσεις υπόψη, η έκφραση για τη δύναμη που ασκεί το ρευστό στα σωματίδια μειώνεται στην αντίσταση, δηλαδή:

$$\bar{F}_f(\vec{r}, t) = \frac{1}{\tau_p} (\bar{v} - \bar{v}_p). \quad (2.29)$$

Όσον αφορά τον όρο της εξωτερικής δύναμης στην εξίσωση ορμής, η συνολική εξωτερική δύναμη ανα μονάδα μάζας, με βάση την Εξ.(2.19), θα ισούται με:

$$\bar{F}_{ext}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\tau_p} \bar{v}_{ext}. \quad (2.30)$$

Η ενσωμάτωση των Εξ.(2.27), (2.29) και (2.30) στην εξίσωση της ορμής δίνει:

$$\frac{\partial \bar{v}_p}{\partial t} + \bar{v}_p \cdot \nabla \bar{v}_p = -\frac{k_B T_f}{m_p} \nabla \ln c + \frac{1}{\tau_p} (\bar{v} - \bar{v}_p) + \frac{1}{\tau_p} \bar{v}_{ext}. \quad (2.31)$$

Για να αντιμετωπίσουν την επίδραση της αδράνειας στη Brownian διάχυση, οι Fernandez de la Mora and Rosner (1982), πρότειναν μια 1^{ης} τάξης διόρθωση της ταχύτητας των σωματιδίων εξαιτίας της αδράνειας των σωματιδίων. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω ανάπτυξης της εξίσωσης ορμής των σωματιδίων στο όριο μικρών χρόνων χαλάρωσης, τ_p , στην περίπτωση μόνιμης, ισοθερμικής ροής αερολύματος. Η Εξ.(2.31) τώρα γράφεται ως:

$$\tau_p \bar{v}_p \cdot \nabla \bar{v}_p = \bar{v} - \bar{v}_p - \frac{k_B T_f}{m_p} \tau_p \nabla \ln c + \bar{v}_{ext}. \quad (2.32)$$

Αν η ταχύτητα των σωματιδίων γραφεί ως:

$$\bar{v}_p = \bar{v}_p^{(0)} + \tau_p \bar{v}_p^{(1)} + O(\tau_p^2), \quad (2.33)$$

όπως προτάθηκε από τους Fernandez de la Mora and Rosner (1982), τότε αγνοώντας τους όρους μεγαλύτερης τάξης, η Εξ.(2.32) γίνεται:

$$\tau_p [\bar{v}_p^{(0)} + \tau_p \bar{v}_p^{(1)}] \cdot \nabla [\bar{v}_p^{(0)} + \tau_p \bar{v}_p^{(1)}] = \bar{v} - [\bar{v}_p^{(0)} + \tau_p \bar{v}_p^{(1)}] - \frac{k_B T_f}{m_p} \tau_p \nabla \ln c + \bar{v}_{ext}, \quad (2.34)$$

ή ισοδύναμα:

$$\begin{aligned} & \tau_p^3 [\bar{v}_p^{(1)} \cdot \nabla \bar{v}_p^{(1)}] + \\ & \tau_p^2 [\bar{v}_p^{(0)} \cdot \nabla \bar{v}_p^{(1)} + \bar{v}_p^{(1)} \cdot \nabla \bar{v}_p^{(0)}] + \\ & \tau_p^1 \left[\bar{v}_p^{(1)} + \bar{v} \cdot \nabla \bar{v} + \frac{k_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \right] + \tau_p^0 [\bar{v}_p^{(0)} - \bar{v} - \bar{v}_{ext}] = 0 \end{aligned} \quad (2.35)$$

Οι όροι 2^{ης} ή υψηλότερης τάξης ως προς τ_p θεωρούνται αμελητέοι. Επομένως, από τον όρο μηδενικής τάξης προκύπτει ότι:

$$\bar{v}_p^{(0)} = \bar{v} + \bar{v}_{ext}, \quad (2.36)$$

ενώ από τον όρο πρώτης τάξης ότι:

$$\bar{v}_p^{(1)} = -\bar{v} \cdot \nabla \bar{v} - \frac{k_B T_f}{m_p} \nabla \ln c. \quad (2.37)$$

Η ταχύτητα των σωματιδίων (Εξ.(2.33)), λοιπόν, είναι ίση προς:

$$\bar{v}_p = \bar{v} + \bar{v}_{ext} - \tau_p \bar{v} \cdot \nabla \bar{v} - D \nabla \ln c + O(\tau_p^2). \quad (2.38)$$

Ο τρίτος όρος της Εξ.(2.38) δείχνει ότι η ταχύτητα των σωματιδίων είναι συμπεσθή για αδρανειακά σωματίδια ανεξάρτητα από την παρουσία της διάχυσης και τη συμπεστότητα του φέροντος ρευστού.

Η ταχύτητα των σωματιδίων μπορεί να διαχωριστεί σε δύο μέρη: μια ταχύτητα διάχυσης, η οποία εξαρτάται μόνο από την χωρική παράγωγο της συγκέντρωσης των σωματιδίων, και μια ταχύτητα συναγωγής ανεξάρτητη της συγκέντρωσης των σωματιδίων. Συγκεκριμένα, η ταχύτητα συναγωγής των σωματιδίων:

$$\vec{v}_c = \vec{v} + \vec{v}_{ext} - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v}, \quad (2.39)$$

εξαρτάται από την ταχύτητα του ρευστού και τις χωρικές παραγώγους αυτής, και ενσωματώνει την επίδραση των αδρανειακών φαινομένων των σωματιδίων και τα εξωτερικά πεδία δυνάμεων.

Το ανάπτυγμα μικρών χρόνων χαλάρωσης αποσυνδέει τις εξισώσεις μάζας και ορμής της σωματιδιακής φάσης. Για το λόγο αυτό, η διατήρηση μάζας της σωματιδιακής φάσης (Εξ.(2.22)), σε μόνιμες συνθήκες, παίρνει τη μορφή μιας τροποποιημένης εξίσωσης συναγωγής-διάχυσης:

$$\nabla \cdot [c(\vec{v}_c - D \nabla \ln c)] = 0, \quad (2.40)$$

ή ισοδύναμα:

$$\nabla \cdot (c \vec{v}_c) = \nabla \cdot (D \nabla c), \quad (2.41)$$

επειδή $c \nabla \ln c = \nabla c$. Βάσει της Εξ.(2.39), η Εξ.(2.41) γράφεται με όρους της ταχύτητας του ρευστού και των εξωτερικών ταχυτήτων:

$$\nabla \cdot [c(\vec{v} + \vec{v}_{ext} - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v})] = \nabla \cdot (D \nabla c). \quad (2.42)$$

Οι Εξ.(2.41) ή (2.42) αποτελούν τις διευρυμένες εξισώσεις μεταφοράς σωματιδίων που ενσωματώνουν την επίδραση της συναγωγής, διάχυσης και αδράνειας των σωματιδίων, καθώς και των εξωτερικών δυνάμεων που ασκούνται σε αυτά σε περιγραφή κατά Euler, και είναι 1^{ης} τάξης ως προς τον χρόνο χαλάρωσης των σωματιδίων.

Σε ολοκληρωματική μορφή, η Εξ.(2.41) γράφεται:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (c \vec{v}_c) d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (D \nabla c) d\Omega, \quad (2.43)$$

η οποία απλοποιείται με χρήση του θεωρήματος Gauss:

$$\int_S c \vec{v}_c \cdot d\vec{S} = D \int_S \nabla c \cdot d\vec{S}, \quad (2.44)$$

ή ισοδύναμα:

$$\int_S c(\vec{v} + \vec{v}_{ext} - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v}) \cdot d\vec{S} = D \int_S \nabla c \cdot d\vec{S}, \quad (2.45)$$

όπου πρόσθετα θεωρούμε σταθερές ιδιότητες ρευστού και σωματιδίων, άρα σταθερό συντελεστή διάχυσης.

Στην παρούσα εργασία, επικεντρωνόμαστε σε ροές συστημάτων ρευστού-σωματιδίων μέσα σε αγωγούς (εσωτερικές ροές). Η διάμετρος του αγωγού, d_t , η μέση ταχύτητα του ρευστού στην είσοδο, v_o , και η μέση συγκέντρωση μάζας στην είσοδο, c_o , χρησιμοποιούνται ως χαρακτηριστικά μεγέθη για την αδιαστατοποίηση της Εξ.(2.45). Ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις για τα διάφορα μεγέθη:

$$\begin{aligned} c &= c_o c' \\ \vec{r} &= d_t \vec{r}', \quad \vec{S} = d_t^2 \vec{S}', \quad \nabla = \frac{1}{d_t} \nabla' \\ \vec{v} &= v_o \vec{v}', \quad \vec{v}_{ext} = v_o \vec{v}'_{ext} \\ \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} &= \frac{v_o^2}{d_t} \vec{v}' \cdot \nabla' \vec{v}' \end{aligned} \quad (2.46)$$

Οι Εξ. (2.46) εισάγονται στην Εξ.(2.45), οπότε τελικά λαμβάνουμε:

$$\int_S c \left(\bar{v} + \bar{v}_{ext} - \frac{\tau_p}{d_t / \nu_o} \bar{v} \cdot \nabla \bar{v} \right) \cdot d\bar{S} = \frac{D}{d_t \nu_o} \int_S \nabla c \cdot d\bar{S}. \quad (2.47)$$

Ωστόσο, ο συντελεστής του όρου της αδράνειας ισούται με τον αριθμό Stokes των σωματιδίων:

$$St = \frac{\tau_p}{d_t / \nu_o}, \quad (2.48)$$

ενώ ο συντελεστής του όρου διάχυσης είναι ο αντίστροφος του αριθμού Peclet, ο οποίος ορίζεται ως:

$$Pe = \frac{d_t \nu_o}{D}, \quad (2.49)$$

και αποτελεί τον λόγο της ροής λόγω συναγωγής προς τη ροή λόγω διάχυσης. Καθώς ο Pe αυξάνει, η ροή συναγωγής γίνεται σημαντικότερη της ροής λόγω διάχυσης, και αντιστρόφως. Τονίζεται, ότι για τις ίδιες συνθήκες ροής, υψηλοί αριθμοί Peclet σημαίνουν χαμηλούς συντελεστές διάχυσης, οπότε μεγαλύτερα σωματίδια.

Τελικά, η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων σε ολοκληρωματική, αδιάστατη μορφή γράφεται (για ευκολία ο τόνος παραλείπεται):

$$\int_S c (\bar{v} + \bar{v}_{ext} - St \bar{v} \cdot \nabla \bar{v}) \cdot d\bar{S} = Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\bar{S}, \quad (2.50)$$

ή χρησιμοποιώντας την (αδιάστατη) ταχύτητα συναγωγής ως:

$$\int_S c \bar{v}_c \cdot d\bar{S} = Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\bar{S}, \quad (2.51)$$

όπου $\bar{v}_c = \bar{v} + \bar{v}_{ext} - St \bar{v} \cdot \nabla \bar{v}$. Η διευρυμένη εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων στη μορφή της Εξ.(2.51) μοιάζει με τη συνήθη εξίσωση μεταφοράς και διάχυσης και, για αυτό, μπορεί να αντιμετωπιστεί αριθμητικά με ανάλογες τεχνικές.

2.2.4 Σωματιδιακή Φάση: Οριακές Συνθήκες

Για όλες τις περιπτώσεις συστημάτων ρευστού-σωματιδίων που εξετάζονται στην παρούσα εργασία, στην είσοδο θεωρούμε ομοιόμορφη κατανομή συγκέντρωσης σωματιδίων (συγκέντρωση εισόδου ίση με τη μονάδα σε αδιάστατη μορφή), δηλαδή:

$$c|_i = 1. \quad (2.52)$$

Η οριακή συνθήκη για τη συγκέντρωση των σωματιδίων στο τοίχωμα είναι η συνθήκη του πλήρως απορροφητικού τοιχώματος:

$$c|_w = 0, \quad (2.53)$$

η οποία στο τοίχωμα δίνει (αδιάστατη) ροή σωματιδίων λόγω διάχυσης, $J^d|_w$, ίση προς:

$$J^d|_w = -Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\bar{S}|_w. \quad (2.54)$$

Επιπλέον, υπάρχει μη-μηδενική, πεπερασμένη ταχύτητα συναγωγής των σωματιδίων ακριβώς πριν το τοίχωμα, εξαιτίας των εξωτερικών δυνάμεων, η οποία έχει ως αποτέλεσμα μια (αδιάστατη) ροή σωματιδίων λόγω συναγωγής, $J^c|_w$, που δίνεται από τη σχέση:

$$J^c|_w = \begin{cases} 0 & \text{if } \bar{v}_c \cdot d\bar{S}|_w \leq 0 \\ \int_S c \bar{v}_c \cdot d\bar{S}|_w & \text{if } \bar{v}_c \cdot d\bar{S}|_w > 0 \end{cases}, \quad (2.55)$$

όπου η ταχύτητα συναγωγής των σωματιδίων, \vec{v}_c , υπολογίζεται ακριβώς πριν από το τοίχωμα, δηλαδή στον υπολογιστικό κόμβο του πλέγματος που βρίσκεται πιο κοντά στο τοίχωμα. Επομένως, αν η ροή συναγωγής στον εγγύτερο κόμβο του πλέγματος είναι προς το τοίχωμα, τότε η ροή αυτή λαμβάνεται ως η ροή εναπόθεσης των σωματιδίων λόγω συναγωγής. Αντίθετα, η ροή συναγωγής είναι ίση με μηδέν. Οι δύο περιπτώσεις της Εξ.(2.55) υποδεικνύουν ότι επιτρέπονται μόνο οι ροές που εξέρχονται από το τοίχωμα. Η είσοδος των σωματιδίων από το τοίχωμα δεν επιτρέπεται, επειδή δεν αντιστοιχεί στα φυσικά προβλήματα που εξετάζονται στην παρούσα εργασία. Επομένως, η συνολική (αδιάστατη) ροή εναπόθεσης γράφεται ως:

$$J_{dep} = J^c|_w + J^d|_w. \quad (2.56)$$

Οι Longest και οι συνεργάτες του (Longest and Oldham, 2008; Xi and Longest, 2008a,b) χρησιμοποίησαν την Εξ.(2.56) για τον υπολογισμό του κλάσματος εναπόθεσης σωματιδίων με $d_p \leq 1\mu m$ ως το άθροισμα των όρων συναγωγής και διάχυσης. Πρόσθετα, ανέλυσαν δύο άλλες εναλλακτικές λύσεις για τον καθορισμό της ροής συναγωγής στα τοιχώματα, και κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι μια διόρθωση της ταχύτητας που βασίζεται σε μια υποπλεγματική Lagrangian επίλυση βελτιώνει τις αριθμητικές προβλέψεις για τα τοπικά και περιφερειακά κλάσματα εναπόθεσης των λεπτών, εισπνεύσιμων αερολυμάτων. Ωστόσο, η θεωρητική βάση των προτάσεων τους δεν είναι πλήρως δικαιολογημένη. Αντιθέτως, φαίνεται σαν να προσπαθούσαν να βρουν έναν τρόπο για να επιτύχουν καλύτερη συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα. Επιπλέον, δεν αναμένουμε ότι η διόρθωση αυτή θα τροποποιήσει σημαντικά τον υπολογισμό της εναπόθεσης στα αποτελέσματα μας, επειδή προσομοιώνουμε υψηλής αδράνειας σωματίδια (σωματίδια υψηλού αριθμού Stokes), των οποίων η ταχύτητα ανταποκρίνεται αργά στις αλλαγές της ταχύτητας του ρευστού. Ταχύτητα τους στον υπολογιστικό κόμβο που βρίσκεται πλησιέστερα στο τοίχωμα, διατηρείται για μεγαλύτερο χρονικό διάστημα από ότι η ταχύτητα λεπτών σωματιδίων ($d_p \leq 1\mu m$). Σημαντική διαφοροποίηση αποτελεί, επίσης, το γεγονός, ότι στην πλειοψηφία των προσομοιώσεων στην παρούσα εργασία, ασκούνται στα σωματίδια μαζικές εξωτερικές δυνάμεις, οι οποίες είναι ανεξάρτητες της ταχύτητας του ρευστού.

2.2.5 Σωματιδιακή Φάση:Αριθμητική Επίλυση

Εφόσον η ταχύτητα του ρευστού, \vec{v} , υπολογιστεί αριθμητικά χρησιμοποιώντας τον κώδικα CADBA, η ταχύτητα συναγωγής των σωματιδίων, \vec{v}_c , υπολογίζεται από την Εξ.(2.39), και στη συνέχεια η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων επιλύεται για την εύρεση της συγκέντρωσης των σωματιδίων. Κύριος στόχος της παρούσας εργασίας είναι η ενσωμάτωση της επίλυσης της PTE στον υπάρχοντα κώδικα επίλυσης της ροής (CADBA), για αυτό η μεθοδολογία που χρησιμοποιείται για την αριθμητική αντιμετώπιση της επιλέγεται να είναι ανάλογη αυτής του φέροντος ρευστού.

Επομένως, η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων επιλύεται στον τριδιάστατο χώρο χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων, με ομόθετη διάταξη μεταβλητών, η οποία λαμβάνει υπόψη τη μη ορθογωνιότητα του πλέγματος και είναι κατάλληλη για multi-block πλέγματα.

Ο όρος συναγωγής στην εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων αντιμετωπίζεται χρησιμοποιώντας μια προσέγγιση αναβαλλόμενης διόρθωσης (deferred correction) 2^{ης} τάξης, για την αποφυγή της εφαρμογής σχημάτων μεγαλύτερης τάξης που θα οδηγούσαν σε μεγάλα υπολογιστικά μόρια (Ferziger and Perić, 2002). Για το λόγο αυτό,

ο όρος συναγωγής διακριτοποιείται σε έναν πεπλεγμένο (implicit) όρο, στον οποίο χρησιμοποιείται ένα ανάντι σχήμα διακριτοποίησης (upwind discretisation scheme – UDS) 1^{ης} τάξης, και ένα ρητό (explicit) όρο, οποίος αποτελεί τη διαφορά του UDS από το σχήμα κεντρικών διαφορών (central difference scheme – CDS) 2^{ης} τάξης και υπολογίζεται με τις τιμές των μεγεθών στην προηγούμενη επανάληψη. Όταν οι επαναλήψεις συγκλίνουν, το σχήμα χαμηλής τάξης (UDS) ακυρώνεται και η λύση που λαμβάνεται αντιστοιχεί στο υψηλότερης τάξης σχήμα (CDS). Το 2^{ης} τάξης σχήμα διακριτοποίησης κεντρικών διαφορών χρησιμοποιείται και για τη διακριτοποίηση του όρου διάχυσης. Το γραμμικό σύστημα που προκύπτει από τη διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων επιλύεται αριθμητικά με την επαναληπτική μέθοδο SIP (Strongly Implicit Procedure), η οποία χρησιμοποιείται και για την επίλυση του πεδίου ροής.

3.1 ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΟΡΟΥ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

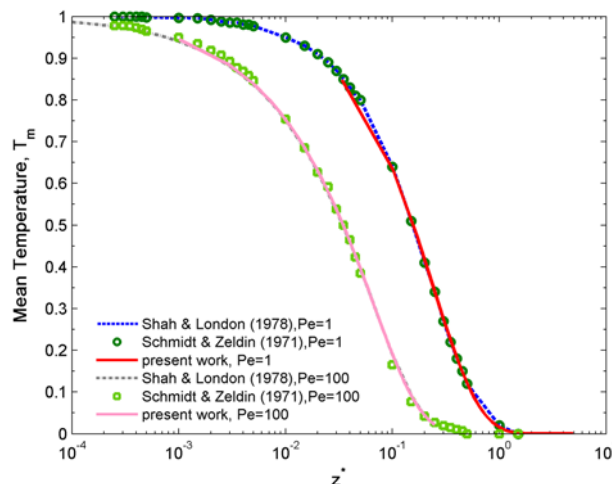
Η αριθμητική διακριτοποίηση του όρου της διάχυσης πιστοποιείται με την επίλυση του προβλήματος συναγωγής-διάχυσης ενός παθητικού ιχνηλάτη. Λαμβάνοντας υπόψη την αναλογία της μεταφοράς μάζας και θερμότητας, προσομοιώσαμε το πρόβλημα Graetz-Nusselt (Shah and London, 1978). Θεωρώντας πλήρως ανεπτυγμένο πεδίο ροής και αναπτυσσόμενο θερμοκρασιακό πεδίο, επιλύθηκε η ακόλουθη εξίσωση σε ευθύγραμμο κυκλικό αγωγό:

$$\int_S T \vec{v} \cdot d\vec{S} = 2Pe_{th}^{-1} \int_S \nabla T \cdot d\vec{S}, \quad (3.1)$$

όπου T η θερμοκρασία, Pe_{th} ο θερμοκός αριθμός Peclet ίσος με $Pe_{th} = d_t v_o / a$, με a τη θερμική αγωγιμότητα του ρευστού. Στην είσοδο του αγωγού θεωρούμε παραβολική κατανομή ταχύτητας (πλήρως ανεπτυγμένο πεδίο ροής) και ομοιόμορφη κατανομή θερμοκρασίας, ενώ στα τοιχώματα χρησιμοποιούμε τη συνθήκη μη ολίσθησης και θεωρούμε σταθερή θερμοκρασία διαφορετική αυτή της εισόδου. Η μέση θερμοκρασία του ρευστού κατά μήκος του αγωγού ορίζεται ως:

$$T_m = \frac{\int_{S_t} T \vec{v} \cdot d\vec{S}_t}{\int_{S_t} \vec{v} \cdot d\vec{S}_t}, \quad (3.2)$$

όπου S_t η διατομή του αγωγού. Στην Εικ.3.1, δίνεται η μέση θερμοκρασία του ρευστού για διάφορους θερμοκούς αριθμούς Peclet, όπου $z^* = z / Pe_{th}$ είναι η αδιάστατη αξονική συντεταγμένη (Shah and London, 1978). Η συμφωνία των αριθμητικών αποτελεσμάτων της παρούσας εργασίας με τα αναλυτικά αποτελέσματα των Shah and London (1978) και τα αριθμητικά αποτελέσματα των Schmidt and Zeldin (1971), είναι άριστη για $Pe_{th} > 1$.



Εικόνα 3.1: Μέση θερμοκρασία σε ευθύγραμμο κυκλικό αγωγό για διάφορους θερμοκούς αριθμούς Peclet.

Συνολικά, η σύγκριση αποδεικνύει ότι η αριθμητική αντιμετώπιση του όρου της διάχυσης είναι ορθή.

3.2 ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΟΡΟΥ ΕΞΩΤΕΡΙΚΩΝ ΔΥΝΑΜΕΩΝ

Ο όρος των εξωτερικών δυνάμεων της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων, θα πιστοποιηθεί μέσω της μελέτης της βαρυτικής καθίζησης, η οποία αποτελεί σημαντικό μηχανισμό εναπόθεσης των μεγάλων σωματιδίων ($d_p > 1\mu m$) στο ανώτερο αναπνευστικό σύστημα. Συγκεκριμένα, επιλύεται το πρόβλημα της μεταφοράς σωματιδίων αερολύματος εντός ευθύγραμμου, κεκλιμένου αγωγού κυκλικής διατομής υπό την επίδραση της βαρύτητας θεωρώντας πλήρως ανεπτυγμένο πεδίο ροής, για το οποίο υπάρχει αναλυτική λύση. Το κλάσμα εναπόθεσης των σωματιδίων στον αγωγό, η , υπολογίζεται αριθμητικά ως:

$$\eta = 1 - \frac{\dot{c}|_{outlet}}{\dot{c}|_{inlet}}, \quad (3.3)$$

όπου $\dot{c} = \int_{S_i} c \vec{v}_p \cdot d\vec{S}_i$ είναι η αδιάστατη παροχή σωματιδίων διαμέσου της επιφάνειας. Οι δείκτες 'inlet' και 'outlet' αναφέρονται στην είσοδο και στην έξοδο του αγωγού, αντίστοιχα.

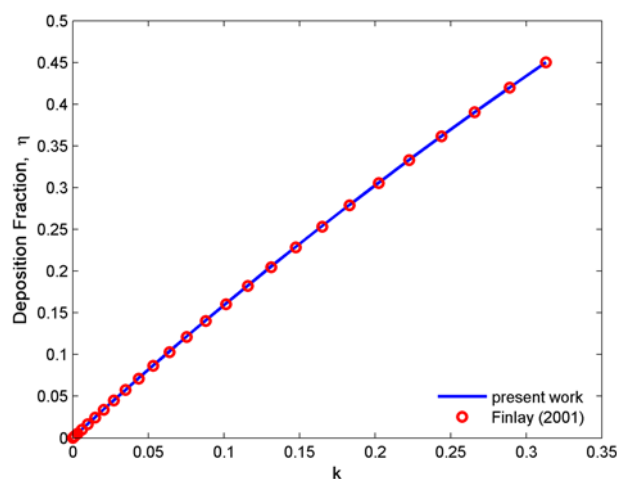
Στην περίπτωση αυτή, η ταχύτητα συναγωγής των σωματιδίων δίνεται από τη σχέση:

$$\vec{v}_p = \vec{v} + \vec{v}_s, \quad (3.4)$$

με \vec{v}_s την ταχύτητα καθίζησης των σωματιδίων. Η ενσωμάτωση της Εξ.(3.4) στην αδιάστατη, ολοκληρωματική μορφή της PTE μας δίνει:

$$\int_S c (\vec{v} + St Fr^{-1} \hat{g}) \cdot d\vec{S} = Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\vec{S}, \quad (3.5)$$

όπου $Fr = v_o^2 / d_t g$ είναι ο αδιάστατος αριθμός Froude, ο οποίος αποτελεί εκτίμηση της σημασίας της συναγωγής των σωματιδίων σε σχέση με τη βαρυτική καθίζηση. Στην Εξ.(3.5), $\hat{g} = \vec{g} / g$, όπου $g = 9.81 m/s^2$, είναι το μοναδιαίο διάνυσμα στην κατεύθυνση της επιτάχυνσης της βαρύτητας.



Εικόνα 3.2: Κλάσμα εναπόθεσης για σωματίδια που επικάθονται σε ευθύγραμμο αγωγό κυκλικής διατομής.

Στην Εικ.3.2, τα αποτελέσματα του μοντέλου κατά Euler συγκρίνονται με την αναλυτική λύση του Finlay (2001) για την περίπτωση της τραχείας (διάμετρος αγωγού

$d_t = 0.018m$, μήκος $L = 0.125m$ και μέση ταχύτητα εισόδου $v_o = 1.166m/s$). Τα αποτελέσματα των δυο εργασιών ταυτίζονται πλήρως. Η παράμετρος k στην εικόνα, ορίζεται ως (Finlay, 2001):

$$k = \frac{3}{4} St \frac{gL}{v_o}. \quad (3.6)$$

3.3 ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΟΡΟΥ ΑΔΡΑΝΕΙΑΚΩΝ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ

Στην προτεινόμενη περιγραφή κατά Euler της σωματιδιακής φάσης, η ταχύτητα των σωματιδίων γράφεται προσεγγιστικά στην εξίσωση διατήρησης μάζας των σωματιδίων (PTE), χρησιμοποιώντας μια έκφραση που προκύπτει στο όριο μικρών χρόνων χαλάρωσης. Ο κύριος στόχος της παρούσας εργασίας είναι η πιστοποίηση της μεθοδολογίας και για σωματίδια με μεγαλύτερους χρόνους χαλάρωσης (ή ισοδύναμα με μεγαλύτερους αριθμούς Stokes), όπου τα αδρανειακά φαινόμενα είναι σημαντικά και η βαρυντική καθίζηση δε μπορεί να αγνοηθεί εκ των προτέρων. Λαμβάνοντας υπόψη ταυτόχρονα την αδράνεια των σωματιδίων και την επίδραση της βαρύτητας, η ταχύτητα των σωματιδίων γράφεται:

$$\vec{v}_p = \vec{v} + \vec{v}_s - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} - D \nabla \ln c + O(\tau_p^2). \quad (3.7)$$

Η Εξ.(3.7) εισάγεται στην ολοκληρωματική, αδιάστατη μορφή της PTE, οπότε λαμβάνουμε:

$$\int_s [\vec{v} + St (Fr^{-1} \hat{g} - 0.5 \vec{v} \cdot \nabla \vec{v})] \cdot \vec{d}S = 0.5 Pe^{-1} \int_s \nabla c \cdot \vec{d}S. \quad (3.8)$$

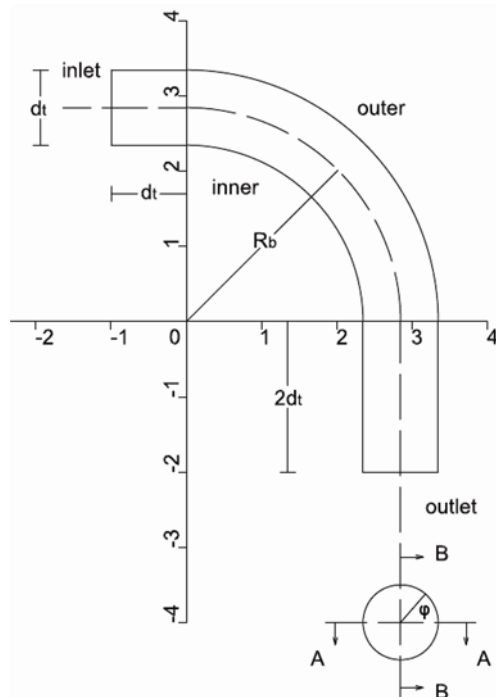
Η Εξ.(3.8) επιλύεται αριθμητικά ώστε να υπολογιστεί το πεδίο συγκέντρωσης κατά τη μεταφορά μεγάλων σωματιδίων αερολύματος ($5\mu m \leq d_p \leq 20\mu m$) σε μια γωνιά 90° κυκλικής διατομής και λόγου καμπυλότητας R_o , θεωρώντας στρωτή ροή αέρα. Τα αποτελέσματα του μοντέλου κατά Euler συγκρίνονται με αποτελέσματα της βιβλιογραφίας. Να σημειωθεί ότι οι συντελεστές '0.5' μπροστά από τους όρους αδράνειας και διάχυσης, είναι αποτέλεσμα του ορισμού των αριθμών Stokes και Peclet, αντιστοίχα, με βάση την ακτίνα του αγωγού, $r_t = d_t / 2$, αντί της διαμέτρου ώστε να συμφωνούν με τις εργασίες της βιβλιογραφίας.

3.3.1 Γεωμετρία Γωνιάς και Υπολογιστικό Πλέγμα

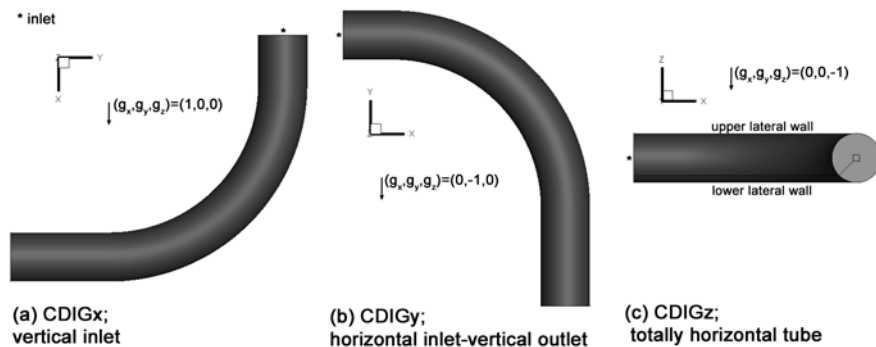
Η εναπόθεση μονοδισπαρμένου αερολύματος στη γωνιά 90° κυκλικής διατομής προσομοιώθηκε υιοθετώντας τη γεωμετρία που προτείνουν οι Pui et al. (1987) και Breuer et al. (2006). Τα βασικά γεωμετρικά χαρακτηριστικά της γωνιάς φαίνονται στην Εικ.3.3. Δύο ευθύγραμμα τμήματα, το πρώτο μήκους d_t πριν την είσοδο της γωνιάς και το δεύτερο μήκους $2d_t$ μετά την έξοδο της, χρησιμοποιούνται για να διασφαλίσουν ότι η ροή του ρευστού στη γωνιά δεν διαταράσσεται από τις συνθήκες στην είσοδο και στην έξοδο του αγωγού. Η διάμετρος της διατομής στο επίπεδο συμμετρίας του αγωγού ($z = 0.5$) σημειώνεται με A-A, ενώ η διάμετρος της διατομής που βρίσκεται κάθετα στο επίπεδο συμμετρίας σημειώνεται με B-B. Με βάση τη γεωμετρία αυτή, ο αριθμός Reynolds της ροής ισούται με $Re = \rho_f v_o d_t / \mu_f$.

Σύμφωνα με την περιγραφή της πειραματικής διάταξης των Pui et al.(1987), ο προσανατολισμός της γωνιάς στον τριδιάστατο χώρο για $Re = 100$ είναι αυτός της

Εικ.3.4(a) και για $Re=1000$ αυτός της Εικ.3.4(b). Τα μοναδιαία διανύσματα της επιτάχυνσης της βαρύτητας φαίνονται, επίσης, στις παραπάνω εικόνες.

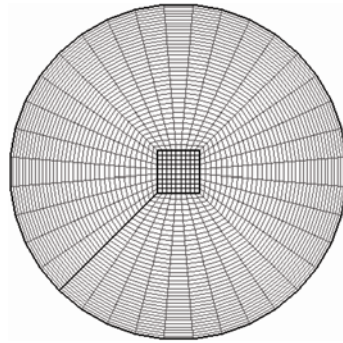


Εικόνα 3.3: Γεωμετρία γωνιάς ($R_b=2.85$, $R_o=5.7$). A-A είναι η διάμετρος στο επίπεδο συμμετρίας και B-B η διάμετρος κάθετα σε αυτό.



Εικόνα 3.4: Προσανατολισμός των γωνιών σχετικά με την επιτάχυνση της βαρύτητας: (a) κατακόρυφη είσοδος (CDIGx), (b) οριζόντια είσοδος - κατακόρυφη έξοδος (CDIGy), και (c) οριζόντιος αγωγός (CDIGz).

Οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας ένα πλέγμα τύπου-O, με δυο τμήματα (multiblock), ώστε να αποφευχθούν τα ιδιόμορφα σημεία ενός πολικού πλέγματος. Συγκεκριμένα, το εξωτερικό τμήμα είναι σχεδόν πολικό και περικλείει ένα τετραγωνικό εσωτερικό τμήμα, όπως φαίνεται στην Εικ.3.5. Το πλέγμα πυκνώνει προς το τοίχωμα του αγωγού, ώστε να υπολογίζεται με μεγαλύτερη ακρίβεια το οριακό στρώμα της συγκέντρωσης, μια περιοχή σημαντική για τον υπολογισμό της εναπόθεσης των σωματιδίων. Η ανάλυση του πλέγματος είναι περί τους 1.46×10^6 υπολογιστικούς όγκους (CVs), αποτελούμενο από περίπου 6500 κόμβους ανα διατομή και 225 κόμβους στην κατεύθυνση της ροής.



Εικόνα 3.5: Διατομή υπολογιστικού πλέγματος.

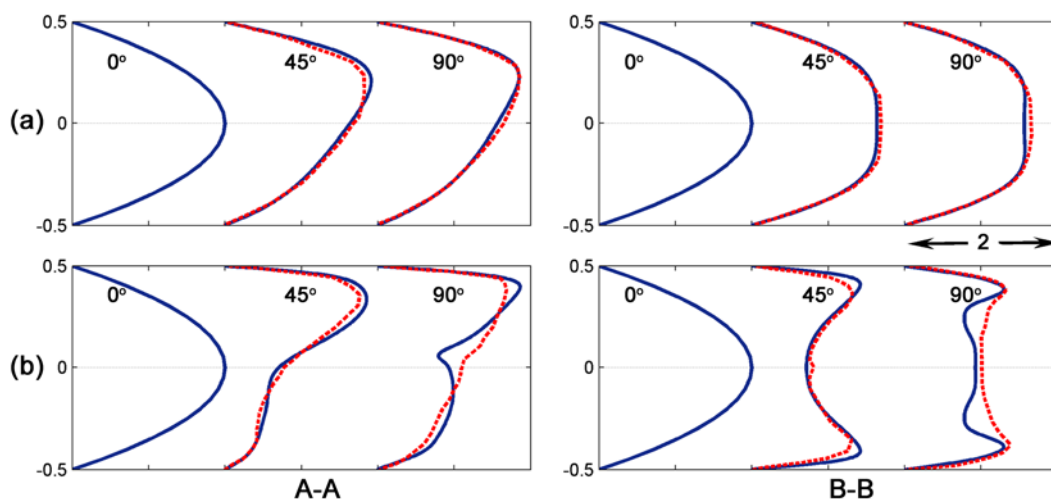
3.3.2 Συνεχής Φάση (Αέρας)

Σε γωνίες κυκλικής διατομής, η ροή του ρευστού εξαρτάται από έναν αδιάστατο αριθμό που ονομάζεται αριθμός Dean (Pui et al., 1987). Ο αριθμός αυτός ορίζεται ως:

$$De = \frac{Re}{\sqrt{R_o}}, \quad (3.9)$$

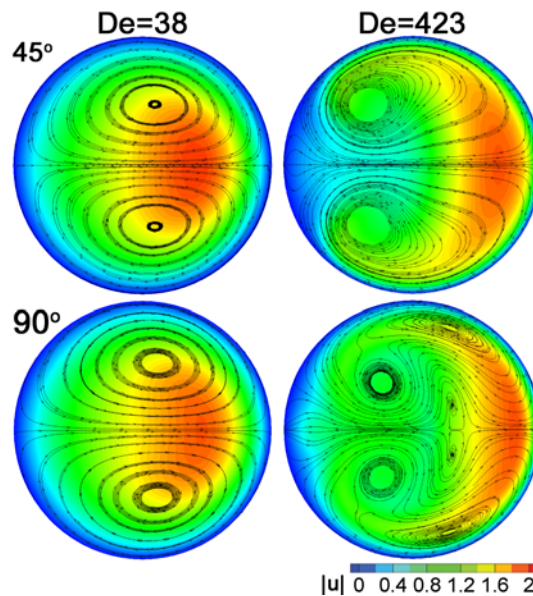
όπου ο λόγος καμπυλότητας δίνεται από τη σχέση $R_o = R_b / r_i$, και αποτελεί ένα μέτρο της σημασίας των φυγοκέντρων και αδρανειακών δυνάμεων του ρευστού σε σχέση με τις συνεκτικές δυνάμεις.

Η ορθότητα του πεδίου ροής που υπολογίζεται στην παρούσα εργασία, επιβεβαιώνεται με προσομοίωση δυο ροών με $De = 38$ ($Re = 100, R_o = 7$) και $De = 423$ ($Re = 1000, R_o = 5.6$). Τα αποτελέσματα δίνονται στην Εικ.3.6. Οι κατανομές της αξονικής ταχύτητας στη διάμετρο A-A (αριστερή στήλη) μετατοπίζονται προς το εξωτερικό τοίχωμα της γωνιάς εξαιτίας των φυγοκέντρων δυνάμεων που ασκούνται στο ρευστό, και η μετατόπιση είναι μεγαλύτερη για υψηλότερους αριθμούς Dean. Οι κατανομές της αξονικής ταχύτητας στη διάμετρο B-B (δεξιά στήλη) παραμορφώνονται αλλά παραμένουν συμμετρικές ως προς το επίπεδο συμμετρίας του αγωγού. Τα αποτελέσματα αυτά είναι συγκρίσιμα με εκείνα των Tsai and Pui (1990).



Εικόνα 3.6: Κατανομές αξονικής ταχύτητας διατομές της γωνιάς $\theta=0^\circ$ (είσοδος), $\theta=45^\circ$ και $\theta=90^\circ$ (έξοδος) κατά μήκος των διαμέτρων A-A(αριστερά) και B-B(δεξιά). (a) $De=38$ και (b) $De=423$. Τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας φαίνονται με συνεχή γραμμή, ενώ εκείνα των Tsai and Pui (1990) με διακεκομμένη.

Στην Εικ.3.7 φαίνονται οι γραμμές ροής και τα επίπεδα σταθερής αξονικής ταχύτητας της δευτερεύουσας ροής, στις διατομές $\theta = 45^\circ$ και $\theta = 90^\circ$ του αγωγού για $De = 38$ (αριστερά) και $De = 423$ (δεξιά). Οι γραμμές ροής της δευτερεύουσας ροής για χαμηλό αριθμό Dean δείχνουν το σχηματισμό ενός ζεύγους συμμετρικών δινών, τα κέντρα των οποίων είναι ελαφρώς μετατοπισμένα προς το εξωτερικό τοίχωμα της γωνιάς και στις δύο διατομές. Είναι, επίσης, εμφανές ότι η μέγιστη αξονική ταχύτητα παρουσιάζεται κοντά στο εξωτερικό τοίχωμα. Τα αποτελέσματά μας είναι αντίστοιχα εκείνων των Pui et al. (1987) για μέσους αριθμούς Dean ($17 \leq De \leq 370$).



Εικόνα 3.7: Γραμμές ροής της δευτερεύουσας ροής και επίπεδα σταθερής αξονικής ταχύτητας στις διατομές $\theta=45^\circ$ (πάνω) και $\theta=90^\circ$ (κάτω) για $De=38$ (αριστερά) και $De=423$ (δεξιά).

Οι γραμμές ροής της δευτερεύουσας ροής για $De = 423$ και $\theta = 45^\circ$, δείχνουν επίσης τον σχηματισμό δύο κύριων, συμμετρικών δινών, τα κέντρα των οποίων όμως έχουν μετατοπιστεί προς το εσωτερικό τοίχωμα και είναι υπό κλίση σε σχέση με το επίπεδο συμμετρίας. Στη διατομή $\theta = 90^\circ$ σχηματίζονται έξι δίνες, η οποίες ανά δύο είναι συμμετρικές ως προς τη διάμετρο A-A, και η μέγιστη αξονική ταχύτητα του ρευστού βρίσκεται ακόμα πιο κοντά στο εξωτερικό τοίχωμα. Τα αποτελέσματα αυτά συμφωνούν τόσο με τις θεωρητικές περιγραφές των Pui et al. (1987) για μεγάλους αριθμούς Dean ($De \geq 370$), όσο και με τις αριθμητικές προσομοιώσεις των Breuer et al. (2006).

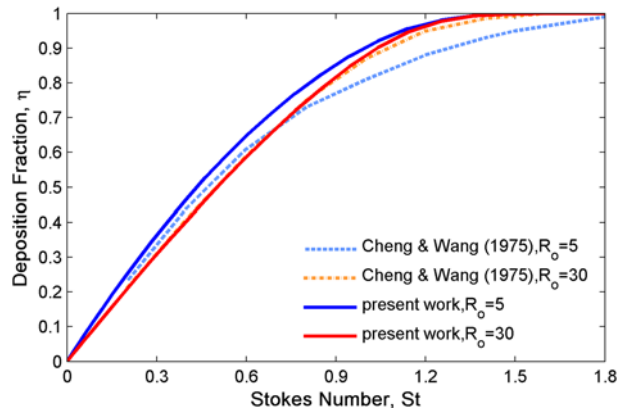
3.3.3 Σωματιδιακή Φάση

Εναπόθεση στη Γωνιά

Υπολογίζονται τα κλάσματα εναπόθεσης των σωματιδίων χρησιμοποιώντας το μοντέλο κατά Euler που αναπτύχθηκε και συγκρίνονται με εκείνα προηγούμενων θεωρητικών και πειραματικών εργασιών. Πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις με πεδία ροής που ελήφθησαν αναλυτικά και υπολογιστικά.

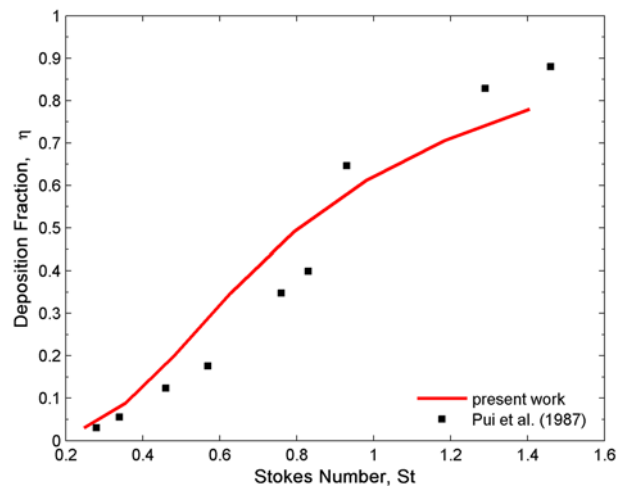
Αρχικά, υπολογίστηκε η εναπόθεση χωρίς να λαμβάνεται υπόψη η βαρυτική καθίζηση, για δύο λόγους καμπυλότητας της γωνιάς, $R_0 = 5$ και 30 , με χρήση του ιδεατού πεδίου ροής των Cheng and Wang (1975), το οποίο δε λαμβάνει υπόψη τη δευτερεύουσα ροή. Τα κλάσματα εναπόθεσης που υπολογίστηκαν με το προτεινόμενο

μοντέλο συγκρίνονται με τα αναλυτικά τους αποτελέσματα στην Εικ.3.8. Οι προβλέψεις του μοντέλου κατά Euler συμφωνούν με την αναλυτική λύση για χαμηλούς αριθμούς Stokes, αλλά διαφέρουν για υψηλούς αριθμούς Stokes και για μικρούς λόγους καμπυλότητας της γωνιάς. Η διαφωνία στους υψηλούς αριθμούς Stokes ήταν αναμενόμενη, εφόσον το μοντέλο βασίζεται σε ανάπτυγμα χαμηλού αριθμού Stokes. Η μέγιστη διαφορά είναι 10% και τείνει στο μηδέν καθώς ο λόγος καμπυλότητας αυξάνει, οπότε τα αδρανειακά φαινόμενα γίνονται πιο αδύναμα.



Εικόνα 3.8: Κλάσμα εναπόθεσης - Σύγκριση με τα αναλυτικά αποτελέσματα των Cheng and Wang (1975).

Επίσης, πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις πειραματικών ροών αερολυμάτων, τα οποία λαμβάνουν υπόψη τόσο τη βαρυτική καθίζηση, όσο και την αδράνεια των σωματιδίων. Οι υπολογισμοί για ροές αερολύματος με αριθμούς Dean 38 και 419 συγκρίνονται με τα πειραματικά αποτελέσματα των Pui et al. (1987), οι οποίοι χρησιμοποίησαν σωματίδια ολεϊκού οξέος με διαμέτρους $5 \div 20 \mu\text{m}$, καθώς και αποτελέσματα Lagrangian υπολογισμών.

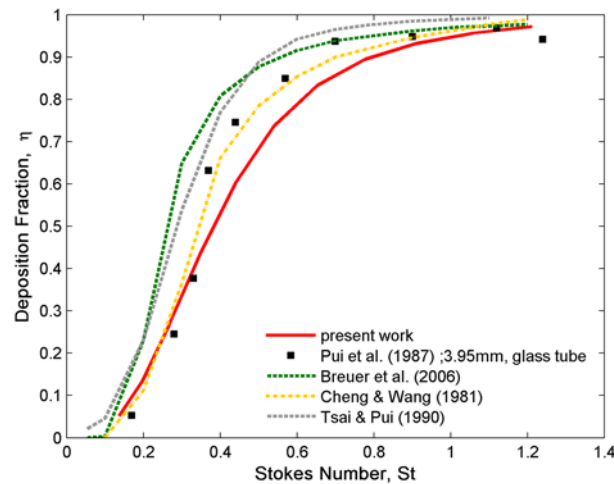


Εικόνα 3.9: Κλάσμα εναπόθεσης για $De=38$ - Σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα.

Τα αποτελέσματα για τα κλάσματα εναπόθεσης που προβλέπει το μοντέλο κατά Euler, συμφωνούν με τα πειραματικά ευρήματα των Pui et al. (1987) τόσο για $De = 38$ όσο και για $De = 419$, όπως φαίνεται στις Εικ.3.9 και 3.10, αντίστοιχα.

Τα πειραματικά αποτελέσματα για $De = 419$, έχουν χρησιμοποιηθεί επανειλημμένα για την πιστοποίηση του υπολογισμού του κλάσματος εναπόθεσης μέσω Lagrangian μεθόδων. Τα αποτελέσματα κάποιων από αυτές τις μελέτες συγκρίνονται με τα δικά μας

στην Εικ.3.10, επιτρέποντας την απευθείας σύγκριση των μεθοδολογιών κατά Euler και κατά Lagrange. Τα κλάσματα εναπόθεσης του μοντέλου κατά Euler διαφέρουν λιγότερο από 10% από τα αποτελέσματα των Cheng and Wang (1981), που πραγματοποίησαν Lagrangian υπολογισμούς χρησιμοποιώντας το αναλυτικό πεδίο ροής των by Mori and Nakayama (1965). Ωστόσο, η διαφορά με τα αριθμητικά αποτελέσματα των Tsai and Pui (1990) και Breuer et al. (2006) φτάνει το 30%. Πρέπει να σημειωθεί ότι στις Lagrangian εργασίες δε λαμβάνεται υπόψη η βαρύτητα. Βρήκαμε, όμως, πως η βαρύτητα δεν είναι σημαντική σε σχέση με τα αδρανειακά φαινόμενα για $De = 419$.

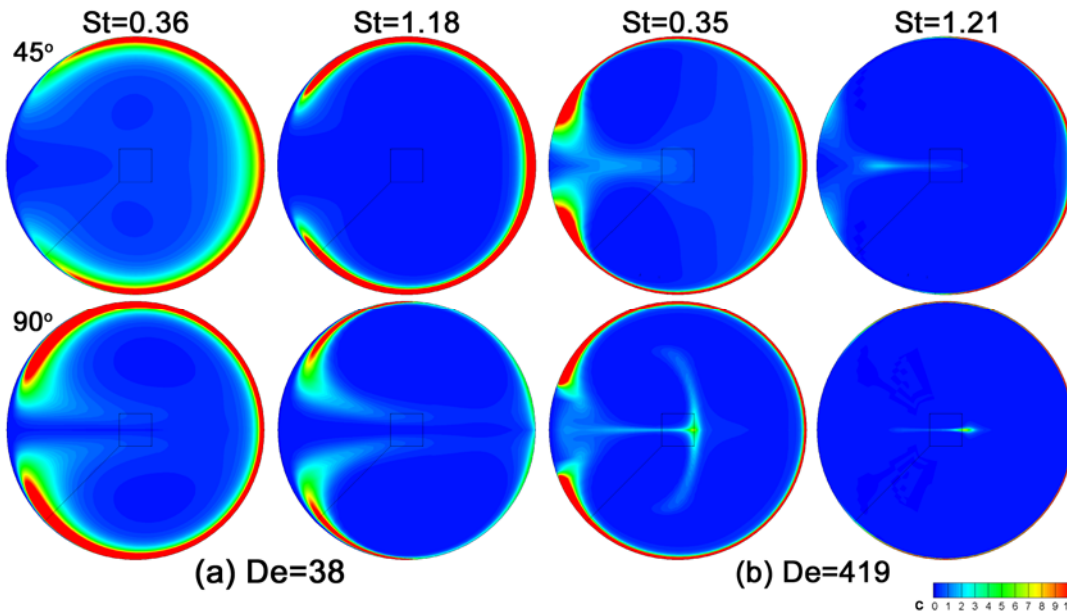


Εικόνα 3.10: Κλάσμα εναπόθεσης για $De=419$ - Σύγκριση με πειραματικές μετρήσεις και αριθμητικά αποτελέσματα.

Κατανομές Συγκέντρωσης Σωματιδίων

Ένα από τα πιο σημαντικά χαρακτηριστικά της περιγραφής κατά Euler είναι ότι επιτρέπει των εύκολο υπολογισμό της κατανομής της συγκέντρωσης των σωματιδίων. Η χωρική κατανομή της συγκέντρωσης των σωματιδίων δίνεται στην Εικ.3.11 στις διατομές $\theta = 45^\circ$ και $\theta = 90^\circ$ του αγωγού για $De = 38$ και $St = 0.36$ (πρώτη στήλη) και 1.18 (δεύτερη στήλη), καθώς και για $De = 419$ και $St = 0.35$ (τρίτη στήλη) και 1.21 (τέταρτη στήλη).

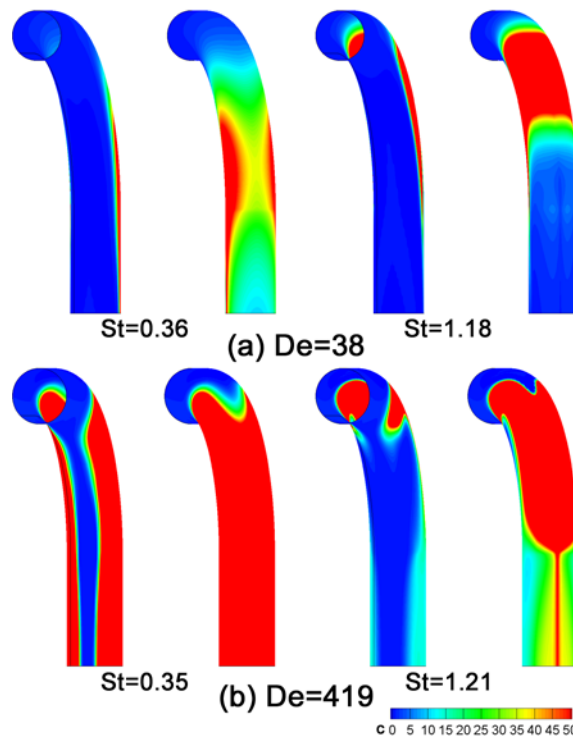
Για τη ροή χαμηλού αριθμού Dean, τα σωματίδια με χαμηλό αριθμό Stokes ($St = 0.36$) ακολουθούν τις γραμμές ροής του ρευστού και μπορούν να αναγνωριστούν τα κύρια χαρακτηριστικά τις δευτερεύουσας ροής του ρευστού. Η εναπόθεση είναι ελάχιστη, αλλά υπάρχει έντονη συσσώρευση σωματιδίων κοντά στα τοιχώματα της γωνιάς. Με αύξηση του αριθμού Stokes, και επομένως των αδρανειακών φαινομένων, η εναπόθεση αυξάνει και τα σωματίδια συσσωρεύονται πιο κοντά στα τοιχώματα. Για $St = 1.18$, το πεδίο συγκέντρωσης των σωματιδίων είναι ποιοτικά διαφορετικό από αυτό του ρευστού, επειδή τα αδρανειακά φαινόμενα κυριαρχούν. Σχεδόν κανένα σωματίδιο δεν εξέρχεται της γωνιάς και το κλάσμα εναπόθεσης τείνει στη μονάδα. Οι μεγάλες περιοχές ελεύθερες σωματιδίων που φαίνονται στην Εικ.3.11, καταδεικνύουν τη δυσκολία υπολογισμού της συγκέντρωσης με την παραδοσιακή Lagrangian μεθοδολογία: θα χρειαζόταν ένα πολύ πυκνό πλέγμα για τον εντοπισμό των μικρών περιοχών που η συγκέντρωση των σωματιδίων είναι πολύ χαμηλή. Τα προαναφερθέντα φαινόμενα είναι πιο εμφανή στην περίπτωση της ροής υψηλού αριθμού Dean ($De = 419$).



Εικόνα 3.11: Κατανομές συγκέντρωσης σωματιδίων στις διατομές $\theta=45^\circ$ (πάνω) και $\theta=90^\circ$ (κάτω). (a) $De=38$ (πρώτες δυο στήλες) και (b) $De=423$ (τελευταίες δυο στήλες).

Περιοχές Εναπόθεσης Σωματιδίων

Οι περιοχές εναπόθεσης σωματιδίων με βάση τη συγκέντρωσή τους στο τοίχωμα διακρίνονται στην Εικ.3.12 για $De = 38$ (πάνω) και $De = 419$ (κάτω).



Εικόνα 3.12: Συγκέντρωση σωματιδίων στο τοίχωμα. (a) $De=38$, και (b) $De=419$.

Στην εικόνα αυτή, φαίνονται οι περιοχές εναπόθεσης για χαμηλούς και υψηλούς αριθμούς Stokes, και η γωνιά φαίνεται τόσο από την εσωτερική όσο και από την εξωτερική πλευρά. Και για τους δυο αριθμούς Dean και για χαμηλούς αριθμούς Stokes,

υπάρχει σημαντική εναπόθεση κοντά στην έξοδο της γωνιάς και στο τελικό ευθύγραμμο τμήμα του αγωγού. Εξαιτίας της δευτερεύουσας ροής, ένας σημαντικός αριθμός σωματιδίων εναποτίθεται στα πλευρικά τοιχώματα της γωνιάς, εκτός από το εξωτερικό τοίχωμα. Για υψηλούς αριθμούς Stokes, τα σωματίδια επικάθονται πιο κοντά στην είσοδο της γωνιάς και, μάλιστα, κυρίως στο εξωτερικό τοίχωμα. Για αυτό και η περιοχή ελεύθερη σωματιδίων στην εσωτερική πλευρά της γωνιάς είναι ευρύτερη σε αυτήν την περίπτωση. Τα προαναφερθέντα χαρακτηριστικά είναι ιδιαίτερα εμφανή για τη ροή υψηλότερου αριθμού Dean. Τα αποτελέσματα αυτά του μοντέλου κατά Euler συμφωνούν με τις πειραματικές παρατηρήσεις των Pui et al. (1987).

3.3.4 Ανεξαρτησία Πλέγματος

Η ανεξαρτησία της επίλυσης της σωματιδιακής φάσης από την ανάλυση του πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε για την περιγραφή της γεωμετρίας, ελέγχθηκε χρησιμοποιώντας πλέγματα διαφόρων πυκνοτήτων. Στον Πίνακα 1, δίνεται το RMS του σχετικού σφάλματος της συγκέντρωσης για διάφορες πυκνότητες πλέγματος, το οποίο ορίζεται ως:

$$\varepsilon_{RMS} = \sqrt{\frac{\sum \varepsilon_i^2}{N}}. \quad (3.10)$$

Το σχετικό σφάλμα δίνεται από τη σχέση:

$$\varepsilon_i = \left| \frac{C_{i,coarse} - C_{i,fine}}{C_{i,fine}} \right|, \quad (3.11)$$

ενώ N είναι ο αριθμός των χρησιμοποιούμενων κόμβων (εδώ 300 από διάφορες περιοχές του υπολογιστικού χωρίου).

CVs (x10 ³)		ε_{RMS} (%)
Coarse	Fine	
276	698	4.53
698	1173	3.48
1173	1457	1.36
1457	1747	0.31

Πίνακας 1: Ανεξαρτησία πλέγματος. Το ε_{RMS} της συγκέντρωσης των σωματιδίων για διάφορες πυκνότητες πλέγματος.

Από τον Πίνακα 1, ότι περαιτέρω αύξηση των κόμβων του επιλεγμένου πλέγματος κατά 20% (από 1457x10³ σε 1747x10³), αλλάζει τη συγκέντρωση λιγότερο από 0.5%. Επομένως, αυτή η ανάλυση πλέγματος χρησιμοποιήθηκε για όλες τις προσομοιώσεις στη γωνιά.

3.4 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στο Κεφάλαιο 3, παρουσιάστηκε η πιστοποίηση του μοντέλου που βασίζεται πλήρως σε περιγραφή κατά Euler, μέσω συγκρίσεων με αναλυτικές, πειραματικές και άλλες αριθμητικές εργασίες της βιβλιογραφίας. Οι όροι της διάχυσης και της επίδρασης των εξωτερικών δυνάμεων πιστοποιήθηκαν ξεχωριστά ο καθένας, πριν προχωρήσουμε στην διερεύνηση του συνολικού μοντέλου. Η σύγκριση με το πρόβλημα Graetz-Nusselt

έδειξε ότι η αριθμητική αντιμετώπιση του όρου της διάχυσης των σωματιδίων είναι ορθή, ενώ και η μελέτη της επίδρασης της βαρύτητας (ως εξωτερική δύναμη) στη μεταφορά των σωματιδίων έδειξε ότι οι προβλέψεις του μοντέλου συμφωνούν απόλυτα με την αναλυτική λύση του προβλήματος.

Σχετικά με την πιστοποίηση του όρου που περιγράφει την αδράνεια των σωματιδίων, τα αποτελέσματα του μοντέλου κατά Euler συγκρίθηκαν με αναλυτικά, πειραματικά και αριθμητικά ευρήματα σχετικά με την εναπόθεση αδρανειακών σωματιδίων σε γωνιά 90° κυκλικής διατομής για στρωτή ροή ρευστού. Συγκεκριμένα, στην περίπτωση που χρησιμοποιείται ένα ιδεατό ροϊκό πεδίο χωρίς δευτερεύουσα ροή, οι προβλέψεις του μοντέλου για χαμηλούς αριθμούς Stokes συμφωνούν με τα αναλυτικά αποτελέσματα, ενώ είναι ελαφρώς αυξημένες για μεγάλους αριθμούς Stokes. Αυτό εξηγείται εύκολα, αν αναλογιστεί κανείς το ότι η δευτερεύουσα ροή δε λαμβάνεται υπόψη στην αναλυτική λύση. Παρ' όλα αυτά, η μέγιστη διαφορά είναι της τάξης του 10% για το μικρότερο λόγο καμπυλότητας της γωνιάς και τείνει στο μηδέν καθώς ο λόγος αυξάνει, γεγονός που καθιστά το μοντέλο κατάλληλο για πρακτικές εφαρμογές. Πρόσθετα, η προσέγγιση κατά Euler συγκρινόμενη με πειραματικά ευρήματα δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα για το κλάσμα εναπόθεσης στη γωνιά τόσο για χαμηλού όσο και υψηλού αριθμού Dean ροή. Επίσης, οι θέσεις εναπόθεσης των σωματιδίων που προβλέπονται στην παρούσα εργασία συμφωνούν, τουλάχιστον ποιοτικά, με τις πειραματικές παρατηρήσεις.

Επομένως, η προσέγγιση που χρησιμοποιείται για τα αδρανειακά φαινόμενα ισχύει για σωματίδια μεγάλης αδράνειας, καθιστώντας τη μεθοδολογία κατά Euler κατάλληλη για ένα μεγάλο εύρος μεγέθους σωματιδίων και, για αυτό, για μια πλειάδα εφαρμογών.

Στα Κεφάλαια 4 και 5, το αναπτυχθέν μοντέλο κατά Euler, χρησιμοποιείται για την μελέτη και καλύτερη κατανόηση της αδράνειας των σωματιδίων καθώς αυτά κινούνται εντός δύο βασικών γεωμετριών: μιας γωνιάς 90° και μια διακλάδωσης. Οι γεωμετρίες αυτές, αν και σχετικά απλές, μπορούν να θεωρηθούν ως τα δομικά στοιχεία του αναπνευστικού συστήματος. Και στις δύο περιπτώσεις εστιάζουμε στη μεταφορά και εναπόθεση βαρέων σωματιδίων ($d_p \geq 1\mu m$), όπου τόσο τα αδρανειακά φαινόμενα, όσο και η επίδραση της βαρύτητας είναι σημαντικοί μηχανισμοί εναπόθεσης.

Στο παρόν Κεφάλαιο, και σε συνέχεια της μελέτης πιστοποίησης (Κεφάλαιο 3), παρουσιάζεται μια παραμετρική μελέτη της ροής αερολύματος σε γωνιά 90° , ώστε να προσδιοριστεί η επίδραση της βαρύτητας, του αριθμού Reynolds της ροής και του λόγου καμπυλότητας της γωνιάς στη ροή του ρευστού και τη μεταφορά των σωματιδίων. Στον Πίνακα 4.1, συνοψίζονται οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στους υπολογισμούς, ενώ στην Εικ.3.4 φαίνονται οι τρεις διαφορετικοί προσανατολισμοί της γωνιάς σε σχέση με την επιτάχυνση της βαρύτητας.

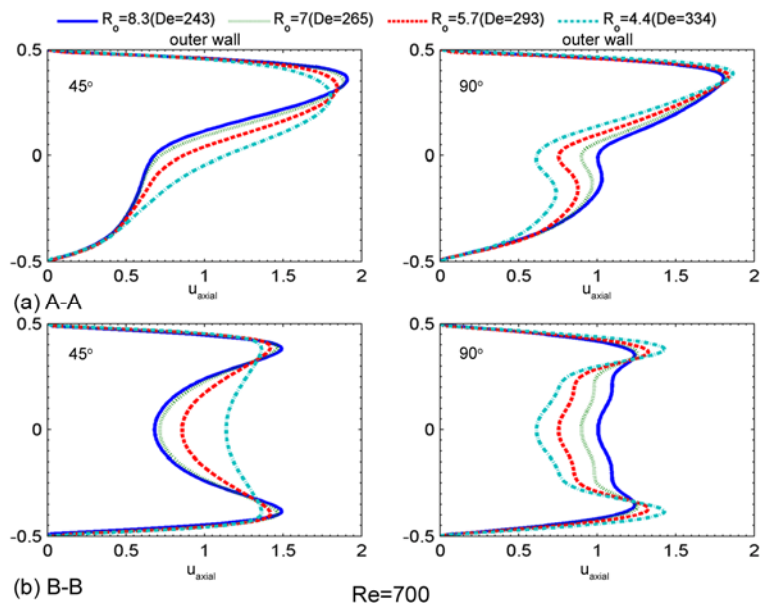
Θερμοκρασία Ρευστού T	293K
Πυκνότητα ρευστού ρ_f	1.21 kg/m ³
Ιξώδες ρευστού μ_f	1.81x10 ⁻⁵ kg/m s
Πυκνότητα σωματιδίων ρ_p	900 kg/m ³
Διάμετρος σωματιδίων d_p	5-20 μm
Αριθμός Reynolds ροής Re	100, 300, 500, 700, 1000
Λόγος καμπυλότητας γωνιάς R_o	4.4, 5.7, 7, 8.3
Επιτάχυνση της βαρύτητας (g_x, g_y, g_z)	(1,0,0), (0,-1,0), (0,0,-1)

Πίνακας 4.1: Ιδιότητες ρευστού και σωματιδίων που χρησιμοποιήθηκαν στην παραμετρική μελέτη της γωνιάς 90° .

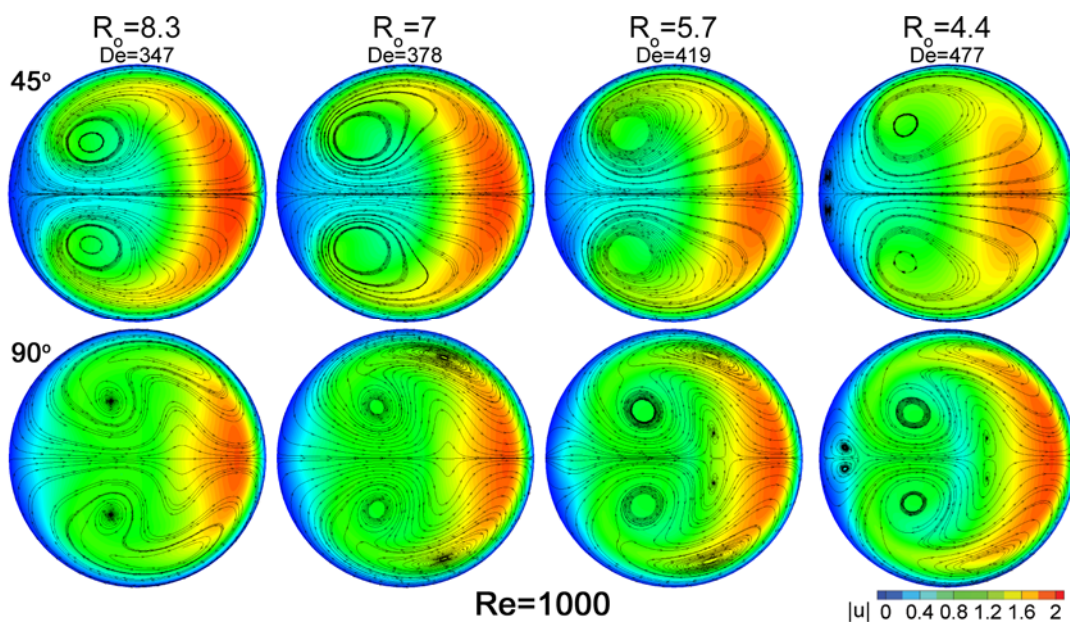
Στη συζήτηση που ακολουθεί, οι διάφορες περιπτώσεις ονομάζονται χρησιμοποιώντας τα αρχικά 'C', 'D', 'I' και 'G' που προέρχονται από τις λέξεις Convection (συναγωγή), Diffusion (διάχυση), Inertia (αδράνεια) και Gravity (βαρύτητα), αντίστοιχα, και υποδεικνύουν ποιοι μηχανισμοί λαμβάνονται υπόψη σε κάθε προσομοίωση. Επιπλέον, οι δείκτες 'x', 'y' και 'z' υποδεικνύουν την κατεύθυνση στην οποία δρα η επιτάχυνση της βαρύτητας: το 'x' αντιστοιχεί σε $\vec{g} = (1,0,0)$, το 'y' σε $\vec{g} = (0,-1,0)$, και το 'z' σε $\vec{g} = (0,0,-1)$.

4.1 ΓΩΝΙΑ: ΡΟΗ ΑΕΡΑ

Σε συμφωνία με προηγούμενες μελέτες (π.χ. Tsai and Pui, 1990), η ανάλυση έδειξε ότι τόσο η κατανομή της αξονικής ταχύτητας, όσο και τα χαρακτηριστικά της δευτερεύουσας ροής του αέρα εξαρτώνται από τον αριθμό Dean της ροής, ο οποίος με τη σειρά του εξαρτάται από τον αριθμό Reynolds της ροής, Re , και το λόγο καμπυλότητας της γωνιάς, R_o . Για αυτό το λόγο, εξετάζεται ξεχωριστά η επίδραση καθεμίας από αυτές τις παραμέτρους ξεχωριστά.

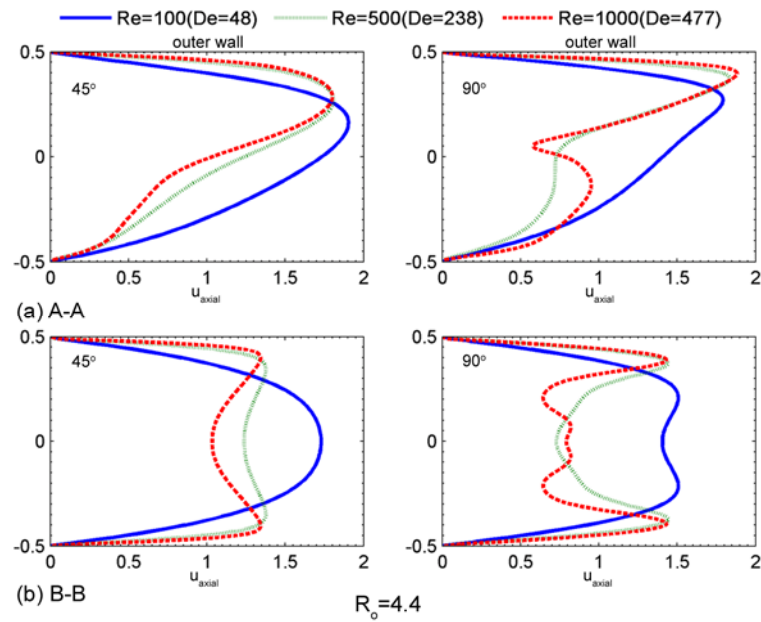


Εικόνα 4.1: Επίδραση του λόγου καμπυλότητας της γωνιάς, R_o , στην κατανομή της αξονικής ταχύτητας στις διατομές $\theta=45^\circ$ (αριστερά) και $\theta=90^\circ$ (δεξιά), για υψηλό αριθμό Reynolds ($Re=700$). (a) διάμετρος A-A, και (b) διάμετρος B-B.

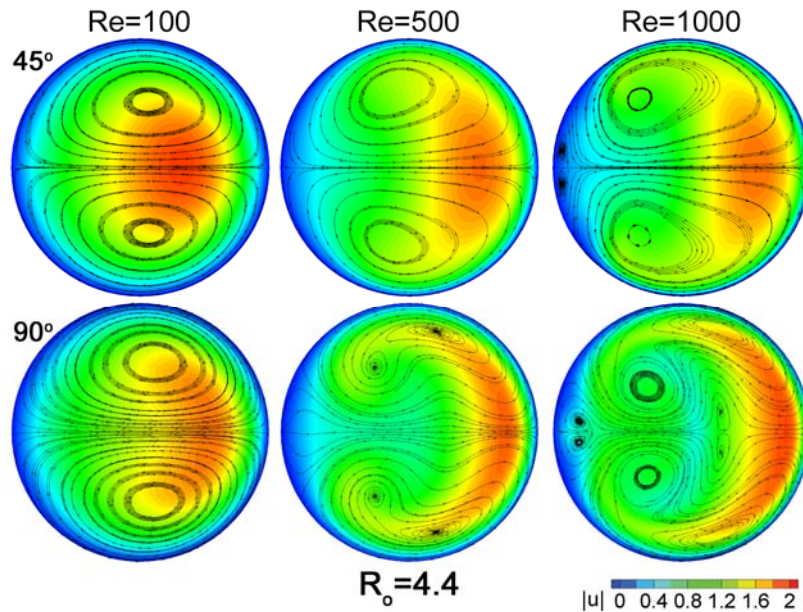


Εικόνα 4.2: Επίδραση του λόγου καμπυλότητας στις γραμμές ροής της δευτερεύουσας ροής και στα επίπεδα σταθερής αξονικής ταχύτητας στις διατομές $\theta=45^\circ$ (πάνω) και $\theta=90^\circ$ (κάτω), για $Re=1000$.

Η ανάλυση δείχνει ότι ο λόγος καμπυλότητας της γωνιάς επηρεάζει διαφορετικά την κατανομή της αξονικής ταχύτητας και τη δομή της δευτερεύουσας ροής για ροές χαμηλού και υψηλού αριθμού Reynolds. Συγκεκριμένα ενώ στην πρώτη περίπτωση ($Re=100$) η ροή είναι σχεδόν ανεξάρτητη του λόγου καμπυλότητας της γωνιάς, για $Re \geq 500$ η επίδραση του R_o είναι εμφανής στις κατανομές της ταχύτητας, κυρίως στο κέντρο του αγωγού (Εικ.4.1), καθώς και στη δευτερεύουσα ροή, όπου σχηματίζονται νέα ζεύγη συμμετρικών δινών με μείωση του λόγου καμπυλότητας (Εικ.4.2). Για κανέναν από τους αριθμούς Reynolds που εξετάστηκαν, όμως, η μέγιστη αξονική ταχύτητα δεν μετατοπίστηκε περαιτέρω προς την εξωτερική πλευρά της γωνιάς καθώς ο λόγος καμπυλότητας μειώνονταν.



Εικόνα 4.3: Επίδραση του αριθμού Reynolds, Re , στην κατανομή της αξονικής ταχύτητας στις διατομές $\theta=45^\circ$ (αριστερά) και $\theta=90^\circ$ (δεξιά), για λόγο καμπυλότητας $Ro=4.4$. (a) διάμετρος A-A, και (b) διάμετρος B-B.



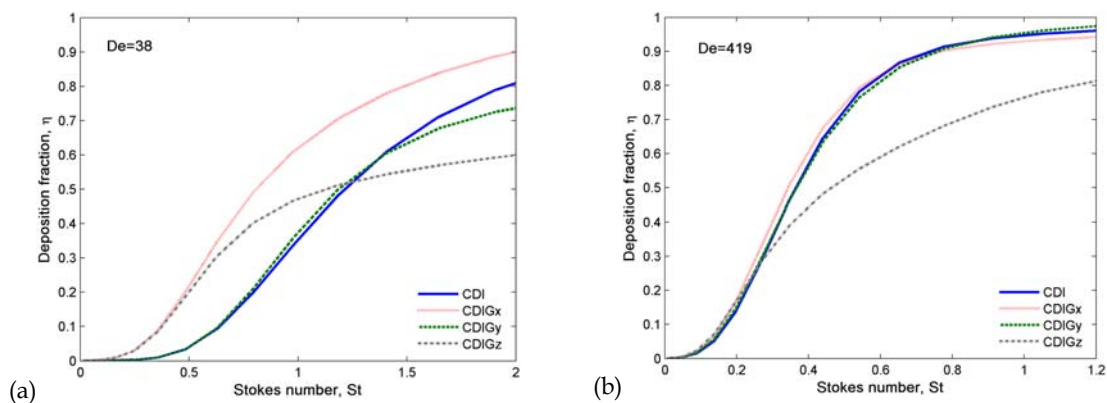
Εικόνα 4.4: Επίδραση του αριθμού Reynolds στις γραμμές ροής της δευτερεύουσας ροής και στα επίπεδα σταθερής αξονικής ταχύτητας στις διατομές $\theta=45^\circ$ (πάνω) και $\theta=90^\circ$ (κάτω), για $Ro=4.4$.

Παρά όλα αυτά, η επίδραση του αριθμού Reynolds στη ροή του αέρα μέσα στη γωνιά είναι σημαντική ανεξάρτητα του λόγου καμπυλότητας της γωνιάς (Εικ.4.3). Συγκεκριμένα, φαίνεται να υπάρχει μια ελάχιστη τιμή του Re , πάνω από την οποία η κατανομή της αξονικής ταχύτητας δε μετακινείται περαιτέρω προς το εξωτερικό τοίχωμα της γωνιάς, για όλους τους λόγους καμπυλότητας που εξετάστηκαν, υπονοώντας ότι τα αδρανειακά φαινόμενα κυριαρχούν και οι φυγόκεντρες δυνάμεις δε μπορούν να επηρεάσουν περαιτέρω τη ροή. Επιπλέον, μπορεί κανείς να παρατηρήσει στην Εικ.4.4, ότι για σταθερό λόγο καμπυλότητας, η αύξηση του αριθμού Reynolds οδηγεί στη δημιουργία νέων συμμετρικών δινών, αλλά και τη μετακίνηση των κέντρων

των ήδη υπάρχοντων προς την εσωτερική πλευρά της γωνιάς και το κέντρο της διατομής, γεγονός ιδιαίτερα εμφανές στη διατομή $\theta = 90^\circ$ (έξοδος γωνιάς).

4.2 ΓΩΝΙΑ: ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ

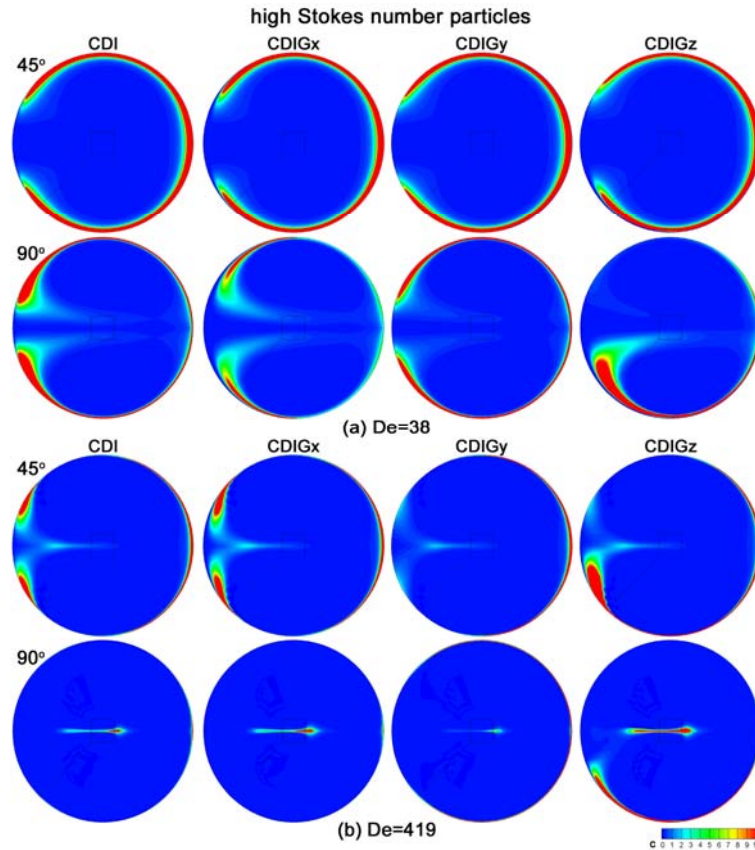
Όσον αφορά τη μεταφορά αδρανειακών σωματιδίων μέσα στη γωνιά, η ανάλυση έδειξε ότι η βαρυντική καθίζηση είναι σημαντικός μηχανισμός εναπόθεσης και δεν πρέπει να αγνοείται εκ των προτέρων. Ο προσανατολισμός του αγωγού σε σχέση με την επιτάχυνση της βαρύτητας είναι σημαντικότερος για ροές αερολύματος χαμηλού αριθμού Reynolds, όπου τα αδρανειακά φαινόμενα είναι λιγότερο ισχυρά (Εικ.4.5(a)). Για $Re = 100$ και σε σύγκριση με τις προσομοιώσεις χωρίς βαρύτητα (CDI), η εναπόθεση στην περίπτωση CDIGx είναι αρκετά υψηλότερη για όλους τους αριθμούς Stokes, στην περίπτωση CDIGy κυμαίνεται στα ίδια επίπεδα, ενώ στην περίπτωση CDIGz η εναπόθεση είναι υψηλότερη για σωματίδια με αριθμό Stokes μικρότερο της μονάδας και χαμηλότερη για μεγαλύτερα σωματίδια. Αντίθετα, για $Re = 1000$, οι περιπτώσεις CDI, CDOGx και CDIGy δίνουν συγκρίσιμα κλάσματα εναπόθεσης, ενώ η εναπόθεση στην περίπτωση CDIGz είναι εμφανώς χαμηλότερη (Εικ.4.5(b)).



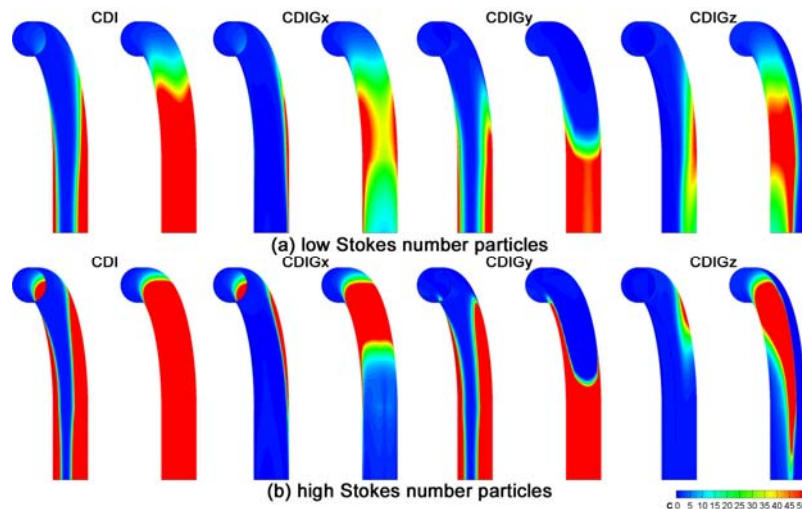
Εικόνα 4.5: Επίδραση της βαρύτητας στο κλάσμα εναπόθεσης. (a) $Re=100$, και (b) $Re=1000$.

Ο προσανατολισμός των αγωγών επηρεάζει, επίσης, τις κατανομές συγκέντρωσης των σωματιδίων. Για χαμηλούς αριθμούς Stokes τα προφίλ συγκέντρωσης δε μεταβάλλονται σημαντικά στις περιπτώσεις CDIGx και CDIGy συγκριτικά με την περίπτωση CDI τόσο για χαμηλούς, όσο και για υψηλούς αριθμούς Reynolds, ενώ για σωματίδια υψηλού αριθμού Stokes υπάρχουν εμφανείς διαφορές στις κατανομές συγκέντρωσης μεταξύ των προαναφερθεισών περιπτώσεων (κυρίως για τις ροές αερολύματος υψηλότερου αριθμού Dean) (Εικ.4.6). Ωστόσο, στα προφίλ του εντελώς οριζόντιου αγωγού (CDIGz) η ασύμμετρη συσσώρευση σωματιδίων προς το κάτω πλαϊνό τοίχωμα της γωνιάς είναι εμφανής και για τους δύο αριθμούς Dean.

Πρόσθετα, η βαρυντικότητα επηρεάζει σημαντικά τις περιοχές επικάθισης των σωματιδίων. Οι διαφορές είναι εντονότερες για ροές χαμηλού αριθμού Dean ανεξάρτητα του μεγέθους των σωματιδίων, ενώ για ροές υψηλού αριθμού Dean, όπου τα αδρανειακά φαινόμενα κυριαρχούν, οι μεταβολές δεν είναι τόσο ευδιάκριτες (Εικ.4.7). Για όλους τους αριθμούς Stokes και Dean, είναι εμφανής η ασυμμετρία στις περιοχές εναπόθεσης στην περίπτωση CDIGz.



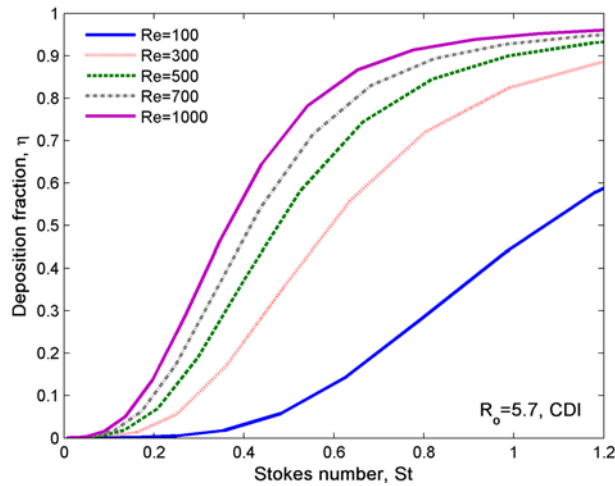
Εικόνα 4.6: Επίδραση της βαρύτητας στις κατανομές συγκέντρωσης των σωματιδίων για μεγάλα σωματίδια στις διατομές $\theta=45^\circ$ (πάνω) και $\theta=90^\circ$ (κάτω). (a) $De=38$, και (b) $De=419$.



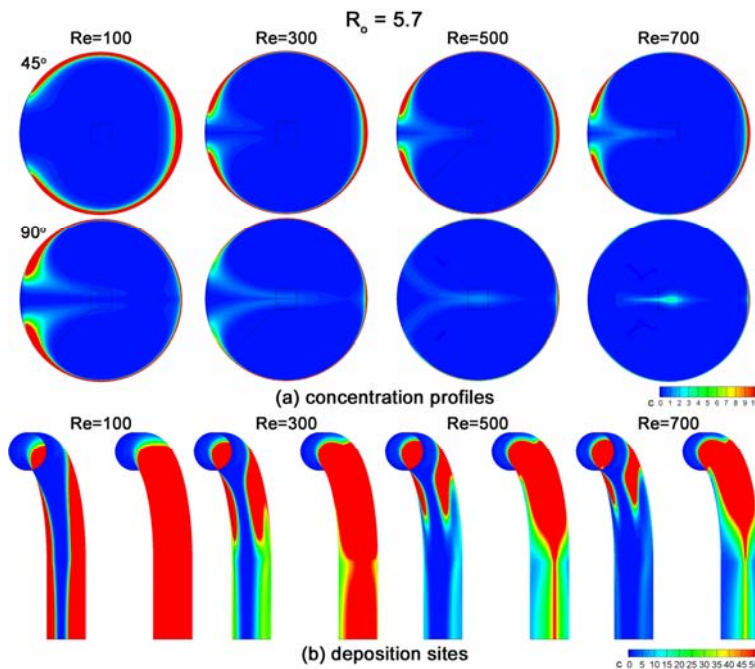
Εικόνα 4.7: Επίδραση της βαρύτητας στις περιοχές εναπόθεσης των σωματιδίων για ροή αερολύματος με $De=38$. (a) Σωματίδια χαμηλού αριθμού Stokes, και (b) Σωματίδια υψηλού αριθμού Stokes.

Επίσης, διερευνήθηκε η επίδραση του αριθμού Reynolds της ροής και του λόγου καμπυλότητας της γωνιάς, χωρίς να ληφθεί υπόψη η βαρυντική καθίζηση (περίπτωση CDI). Η επίδραση του αριθμού Reynolds στο κλάσμα εναπόθεσης των σωματιδίων είναι ξεκάθαρη: το κλάσμα εναπόθεσης αυξάνει με αύξηση του αριθμού Reynolds (Εικ.4.8). Ωστόσο, παρατηρείται ότι ο ρυθμός αύξησης μειώνεται. Ακόμη, βρέθηκε ότι οι κατανομές συγκέντρωσης και οι περιοχές εναπόθεσης των σωματιδίων επηρεάζονται

από τον αριθμό Reynolds, με τις διαφορές να είναι εντονότερες για μεγαλύτερα σωματίδια (Εικ.4.9).

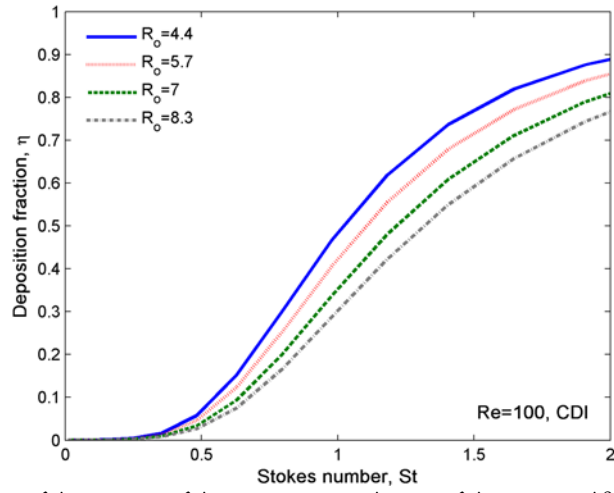


Εικόνα 4.8: Επίδραση του αριθμού Reynolds της ροής στο κλάσμα εναπόθεσης των σωματιδίων για $R_o=5.7$.



Εικόνα 4.9: Επίδραση του αριθμού Reynolds της ροής για σωματίδια υψηλού αριθμού Stokes. (a) Κατανομές συγκέντρωσης στις διατομές $\theta=45^\circ$ (πάνω) και $\theta=90^\circ$ (κάτω), και (b) Περιοχές εναπόθεσης σωματιδίων.

Τέλος, η ανάλυση έδειξε ότι, όπως συμβαίνει και με τη ροή του αέρα, ο λόγος καμπυλότητας της γωνιάς είναι σημαντική παράμετρος για τη μεταφορά σωματιδίων μόνο για ροές χαμηλού αριθμού Reynolds (Εικ.4.10). Στην περίπτωση αυτή, η εναπόθεση αυξάνει με μείωση του R_o , δηλαδή καθώς ο αγωγός γίνεται πιο απότομος και τα αδρανειακά φαινόμενα ισχυρότερα. Επιπλέον, ότι τα προφίλ της συγκέντρωσης και οι περιοχές εναπόθεσης των σωματιδίων δε μεταβάλλονται σημαντικά με το λόγο καμπυλότητας της γωνιάς.



Εικόνα 4.10: Επίδραση του λόγου καμπυλότητας της γωνιάς στο κλάσμα εναπόθεσης των σωματιδίων για $Re=100$.

Αφού εξετάστηκε η ακαδημαϊκή περίπτωση της ροής αερολύματος στη γωνιά 90° , στο παρόν κεφάλαιο, το μοντέλο κατά Euler που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της διατριβής, χρησιμοποιείται για την μελέτη της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων εντός διακλάδωσης που συμφωνεί με τη φυσιολογία του πνεύμονα. Σκοπός είναι να βρεθεί με ποιο τρόπο επηρεάζουν την εναπόθεση το μέγεθος των σωματιδίων και τα χαρακτηριστικά της ροής, και συγκεκριμένα ο αριθμός Reynolds και η συμμετρία της ροής στους θυγατρικούς αγωγούς της διακλάδωσης.

5.1 ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΚΑΙ ΠΛΕΓΜΑ

Στα αριθμητικά πειράματα, χρησιμοποιείται μια φυσιολογικά ρεαλιστική διακλάδωση (physiologically realistic bifurcation - PRB), που βασίζεται στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της τρίτης και τέταρτης γενεάς (G3-G4) του πνεύμονα, σύμφωνα με το μοντέλο του Weibel (1963) (Πίνακας 5.1). Οι συγκεκριμένες γενεές επιλέχθηκαν επειδή έχουν χρησιμοποιηθεί επανειλημμένα στη βιβλιογραφία (Asgharian and Anjilvel, 1994; Kim et al., 1994; Comer et al., 2001a), ενώ έχει πειραματικά αποδειχθεί ότι στην περιοχή αυτή η εναπόθεση των σωματιδίων παρουσιάζει μέγιστο (Schlesinger et al., 1977).

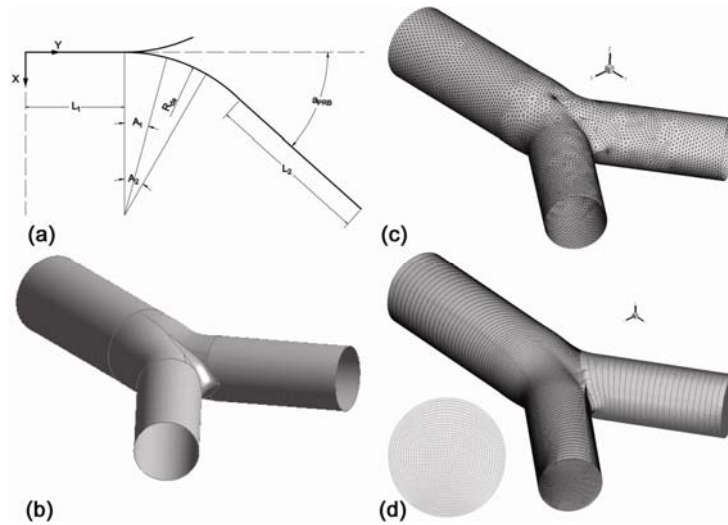
Διακλάδωση G3-G4	
Διάμετρος μητρικού αγωγού, D_1	5.6×10^{-3} m
Μήκος μητρικού αγωγού, L_1	11×10^{-3} m
Διάμετρος θυγατρικού αγωγού, D_2	4.5×10^{-3} m
Μήκος μητρικού αγωγού, L_2	9.2×10^{-3} m
Γωνία διακλάδωσης, α_{prb}	35°

Πίνακας 5.1: Γεωμετρικά χαρακτηριστικά των γενεών G3-G4 σύμφωνα με τον Weibel (1963).

Η PRB γεωμετρία κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας την εφαρμογή Design Modeler του εμπορικού CFD πακέτου ANSYS 11 και τις αναλυτικές εξισώσεις των Heistracher and Hofmann (1995) που περιγράφουν μια καμπυλωμένη κορυφή στην περιοχή της διακλάδωσης. Οι κεντρικές γραμμές του μητρικού και των θυγατρικών αγωγών και ολόκληρη η επιφάνεια της PRB που κατασκευάστηκε, φαίνονται στις Εικ.1(a) και (b), αντίστοιχα.

Το δομημένο τριδιάστατο πλέγμα δύο τμημάτων της PRB παράγεται με τη μεθοδολογία και το λογισμικό των Makris et al. (2011) και Makris and Housiadas (2011), η οποία αρχικά αναπτύχθηκε για την κατασκευή δομημένων πλεγμάτων γεωμετριών που λαμβάνονται από ιατρικές εικόνες ασθενών, όπως τα ανευρύσματα κοιλιακής αορτής ή η κοιλιακή διακλάδωση της αορτής. Τα πλεονέκτημα της μεθόδου αυτής είναι η διατήρηση των σύνθετων αυτών γεωμετριών με χρήση δομημένου πλέγματος, το οποίο παρουσιάζει χαμηλότερη αριθμητική διάχυση και συγκλίνει γρηγορότερα από ένα μη δομημένο πλέγμα (Longest and Vinchurkar, 2007a). Στην Εικ.1(c), φαίνεται το μη δομημένο που δημιουργήθηκε στην επιφάνεια της PRB, ενώ στην Εικ.1(d) φαίνονται το δομημένο τριδιάστατο πλέγμα και η διατομή του. Ο έλεγχος της ανεξαρτησίας της λύσης από την ανάλυση του πλέγματος έδειξε ότι ένα πλέγμα που

αποτελείται από 9×10^5 υπολογιστικού κόμβους, αρκεί για την εύρεση του πεδίου ροής του ρευστού και της συγκέντρωσης των σωματιδίων.



Εικόνα 5.1: (a) Κεντρικές γραμμές και γεωμετρικά χαρακτηριστικά της G3-G4 διακλάδωσης (λόγω γεωμετρικής συμμετρίας φαίνεται μόνο ο ένας θυγατρικός αγωγός), (b) Η επιφάνεια της G3-G4 διακλάδωσης με την καμπλωμένη κορυφή στην περιοχή της διακλάδωσης, (c) Το μη δομημένο επιφανειακό πλέγμα, και (d) Το δομημένο πλέγμα και η διατομή του.

5.2 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ

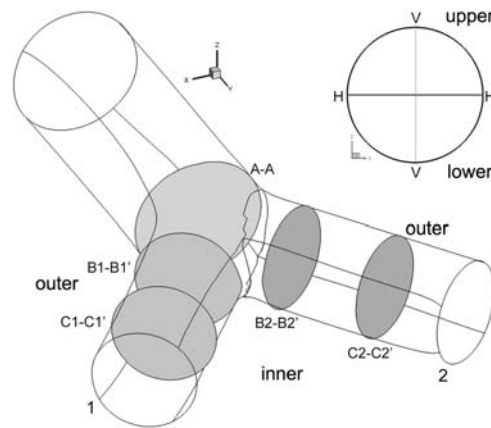
Στη μελέτη της PRB, χρησιμοποιείται το μοντέλο κατά Euler για τον υπολογισμό της ροής του αέρα και της συγκέντρωσης των σωματιδίων. Συγκεκριμένα για τη σωματιδιακή φάση, δίνονται οι κατανομές συγκέντρωσης και υποδεικνύονται θέσεις εναπόθεσης των σωματιδίων, εκτός των κλασμάτων εναπόθεσης. Στον Πίνακα 5.1, συνοψίζονται οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στα αριθμητικά πειράματα της ροής αερολύματος στη διακλάδωση.

Για τους τρεις διαφορετικούς αριθμούς Reynolds της ροής, θεωρείται συμμετρία στη ροή των δύο θυγατρικών κλάδων, ενώ για $Re=1132$ εξετάζονται ακόμα δύο περιπτώσεις ασύμμετρης ροής. Συγκεκριμένα, αν Q_1 , Q_2 είναι οι παροχές που εξέρχονται των θυγατρικών αγωγών 1 και 2, αντίστοιχα, τότε εξετάζονται οι περιπτώσεις $Q_1/Q_2 = 2$, δηλαδή που από τον έναν αγωγό εξέρχεται διπλάσια ροή από ότι τον άλλον, και $Q_2 = 0$, όπου από τον έναν αγωγό δεν εξέρχεται ρευστό. Η πρώτη περίπτωση αντιστοιχεί σε μερικά αποφραγμένη ροή, ενώ η δεύτερη σε πλήρως αποφραγμένη ροή στον θυγατρικό αγωγό 2.

Στην είσοδο της διακλάδωσης θεωρούμε παραβολικό προφίλ ταχύτητας και ομοιόμορφη κατανομή σωματιδίων για όλες τις περιπτώσεις. Στην Εικ.5.2, ορίζονται διάφορες διατομές. Συγκεκριμένα, η διατομή A-A βρίσκεται στον μητρικό αγωγό στην αρχή της περιοχής της διακλάδωσης ($y = 2.4$), ενώ οι διατομές B-B' και C-C' βρίσκονται κατάντι της διακλάδωσης, στις θέσεις $y = 3.5$ και $y = 4.5$, αντίστοιχα. Οι δείκτες 1 και 2 αναφέρονται στον αντίστοιχο θυγατρικό αγωγό. Σημειώνεται, ωστόσο, ότι στην παρουσίαση των αποτελεσμάτων ο δείκτης παραλείπεται για τις συμμετρικές ροές. Πρόσθετα, στο ένθετο της Εικ.5.2, ορίζονται οι διάμετροι H-H και V-V μιας διατομής που βρίσκονται παράλληλα και κάθετα, αντίστοιχα, στο γεωμετρικό επίπεδο συμμετρίας της PRB, $z = 0$.

Θερμοκρασία Ρευστού T	293K
Πυκνότητα ρευστού ρ_f	1.21 kg/m ³
Ιξώδες ρευστού μ_f	1.81x10 ⁻⁵ kg/m s
Πυκνότητα σωματιδίων ρ_p	900 kg/m ³
Διάμετρος σωματιδίων d_p	1-10 μm
<i>Ξεκούραση</i>	
Αριθμός Reynolds ροής Re	464
Μέση ταχύτητα ρευστού u_0	1.24 m/s
<i>Ελαφριά άσκηση</i>	
Αριθμός Reynolds ροής Re	1132
Μέση ταχύτητα ρευστού u_0	3.02 m/s
<i>Έντονη άσκηση</i>	
Αριθμός Reynolds ροής Re	1788
Μέση ταχύτητα ρευστού u_0	4.78 m/s

Πίνακας 5.2: Ιδιότητες ρευστού και σωματιδίων που χρησιμοποιήθηκαν στην παραμετρική μελέτη της G3-G4 διακλάδωσης.



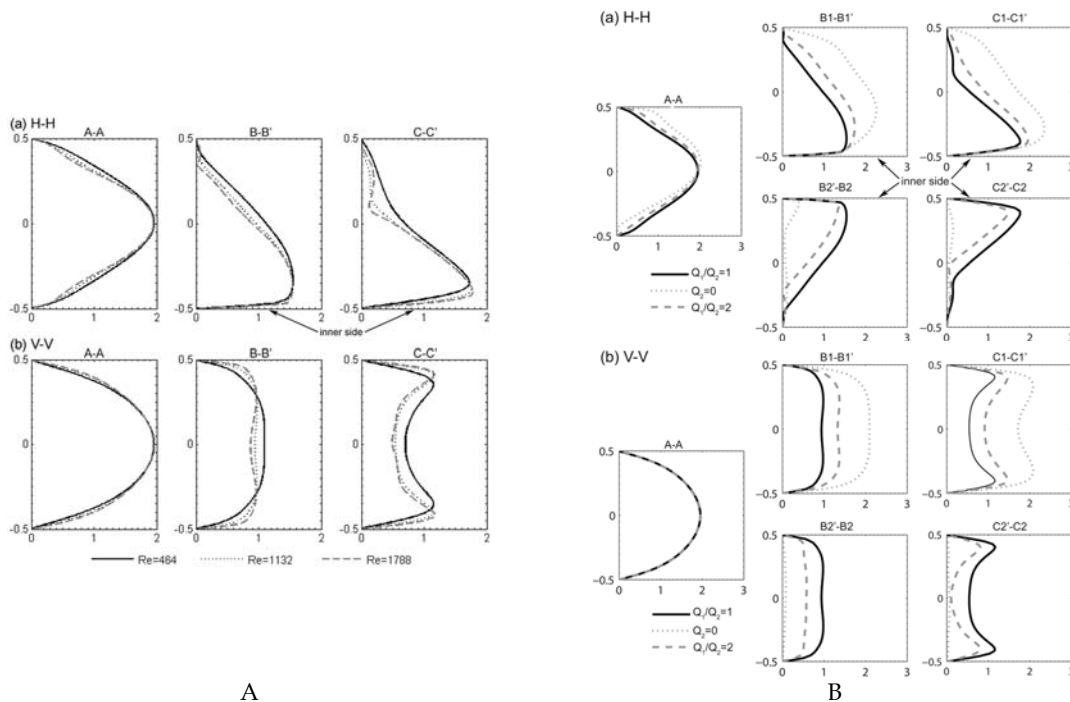
Εικόνα 5.2: Ορισμός διατομών και διαμέτρων ενδιαφέροντος.

5.2.1 PRB: Ροή Αέρα

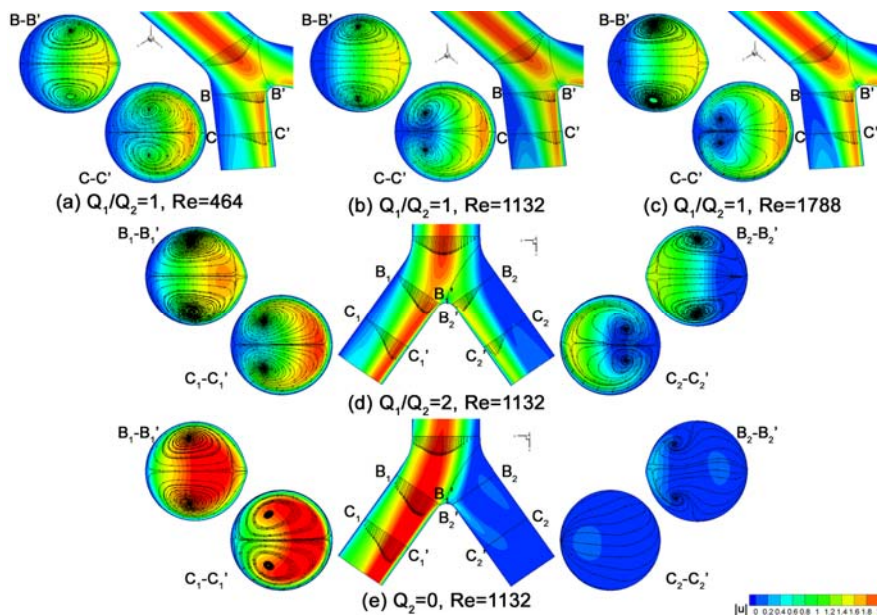
Η επίδραση του αριθμού Reynolds στην κατανομή της αξονικής ταχύτητας του αέρα φαίνεται στην Εικ.5.3A για συμμετρική ροή σε διάφορες διατομές. Στη διατομή A-A, η το προφίλ της αξονικής ταχύτητας είναι σχεδόν ανεξάρτητο του αριθμού Reynolds. Αντίθετα, στους θυγατρικούς αγωγούς (διατομές B-B' και C-C'), η μέγιστη αξονική ταχύτητα μετατοπίζεται προς την εσωτερική πλευρά της διακλάδωσης (διάμετρος H-H), εξαιτίας των φυγοκέντρων δυνάμεων που ασκούνται στο ρευστό. Προς την έξοδο του θυγατρικού αγωγού η μέγιστη αξονική ταχύτητα μετακινείται προς το κέντρο του αγωγού και καθώς ο Re αυξάνει μια δεύτερη (μικρότερη) κορυφή εμφανίζεται κοντά στην εξωτερική πλευρά. Τα αποτελέσματα αυτά συμφωνούν με τα ευρήματα άλλων εργασιών, όπως π.χ. οι εργασίες των Balásházy and Hofmann (1993) και Comer et al. (2001b).

Παρόμοια, στην Εικ.5.3B φαίνεται η επίδραση της ασυμμετρίας της ροής στα προφίλ της αξονικής ταχύτητας για $Re = 1132$. Αντίθετα με τις συμμετρικές ροές, η αξονική ταχύτητα την H-H διάμετρο της διατομής A-A δεν είναι πια συμμετρικές και η μετατόπιση τους οφείλεται στην απόφραξη του θυγατρικού αγωγού 2 (Comer et al., 2001b) και είναι εντονότερη στην περίπτωση της πλήρως αποφραγμένης ροής, $Q_2 = 0$. Κατάντι της διακλάδωσης, κατά μήκος της διαμέτρου H-H, η μέγιστη αξονική ταχύτητα για τις ασύμμετρες ροές παραμένει μετατοπισμένη προς την εσωτερική πλευρά της

διακλάδωσης, αλλά είναι αισθητά χαμηλότερη στο θυγατρικό αγωγό 2. Επίσης, φαίνεται ότι στο θυγατρικό αγωγό 1, η ροή επιταχύνει σε σχέση με τη συμμετρική περίπτωση.



Εικόνα 5.3: Κατανομές αξονικής ταχύτητας στις διατομές A-A (αριστερά), B-B' (μέσο) και C-C' (δεξιά) στις διαμέτρους H-H και V-V: Α. Επίδραση αριθμού Reynolds για συμμετρικές ροές, και Β. Σύγκριση μεταξύ συμμετρική και ασύμμετρων ροών για $Re=1132$.



Εικόνα 5.4: Επίπεδα σταθερής ταχύτητας και διανύσματα στο επίπεδο συμμετρίας της PRB ($z=0$) και γραμμές ροής της δευτερεύουσας ροής σε διάφορες διατομές καπάντι της διακλάδωσης: (a) $Q_1/Q_2=1, Re=464$, (b) $Q_1/Q_2=1, Re=1132$, (c) $Q_1/Q_2=1, Re=1788$, (d) $Q_1/Q_2=2, Re=1132$, και (e) $Q_2=0, Re=1132$.

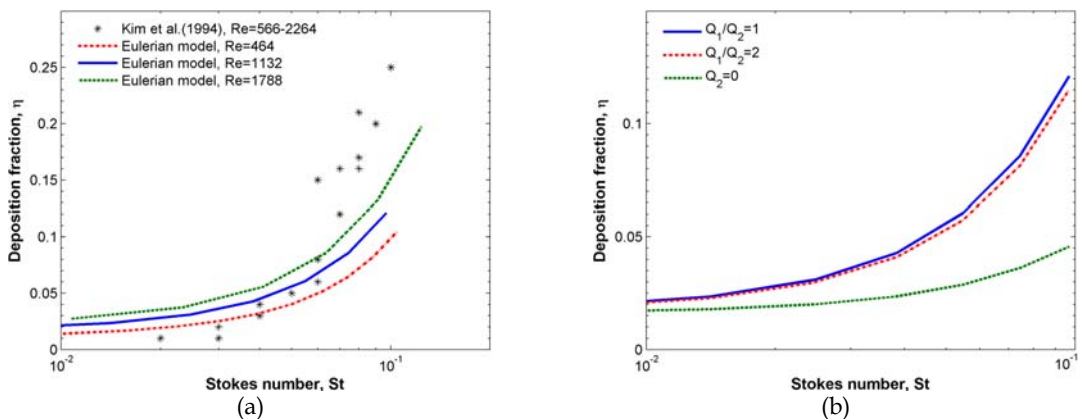
Οι γραμμές ροής της δευτερεύουσας ροής και τα επίπεδα σταθερής ταχύτητας στις διατομές B-B' και C-C' για τις συμμετρικές ροές φαίνονται στην Εικ.5.4(a)-(c). Σε όλες τις περιπτώσεις υπάρχει σχηματισμός δύο συμμετρικών δινών, οι οποίες στη διατομή C-

Οι C' μετατοπίζονται από το κέντρο της διατομής προς την εξωτερική πλευρά της διακλάδωσης και το επίπεδο συμμετρίας $z=0$ καθώς ο Reynolds αυξάνει. Τα αποτελέσματα αυτά είναι ποιοτικά συγκρίσιμα με αυτά άλλων αριθμητικών μελετών (Comer et al., 2001b; Longest and Vinchurkar, 2007b; Martonen et al., 2001a,b).

Επίσης, στην Εικ.5.4(d)-(e) παρουσιάζονται οι γραμμές ροής της δευτερεύουσας ροής και τα επίπεδα σταθερής ταχύτητας στις διατομές B-B' και C-C' για τις ασύμμετρες ροές, $Q_1/Q_2 = 2$ και $Q_2 = 0$, αντίστοιχα. Η ασυμμετρία είναι εμφανής τόσο στα διανύσματα της αξονικής ταχύτητας, όσο και στα επίπεδα σταθερής ταχύτητας, ενώ συγκρίνοντας τις αντίστοιχες διατομές μεταξύ των δύο θυγατρικών αγωγών, διακρίνονται και οι διαφορές στη δευτερεύουσα ροή.

5.2.2 PRB: Σωματίδια

Τα πεδία ροής που υπολογίστηκαν, χρησιμοποιούνται στη συνέχεια για τον υπολογισμό της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων με διαμέτρους $1\mu\text{m} \leq d_p \leq 10\mu\text{m}$ στη PRB. Ο προσανατολισμός της διακλάδωσης είναι τέτοιος ώστε το μοναδιαίο διάνυσμα της επιτάχυνσης της βαρύτητας να είναι $\hat{g} = (g_x, g_y, g_z) = (0, 1, 0)$ και να συμπίπτει με τον προσανατολισμό της πειραματικής διάταξης των Kim et al. (1994), με τα αποτελέσματα των οποίων θα συγκριθούν τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας.



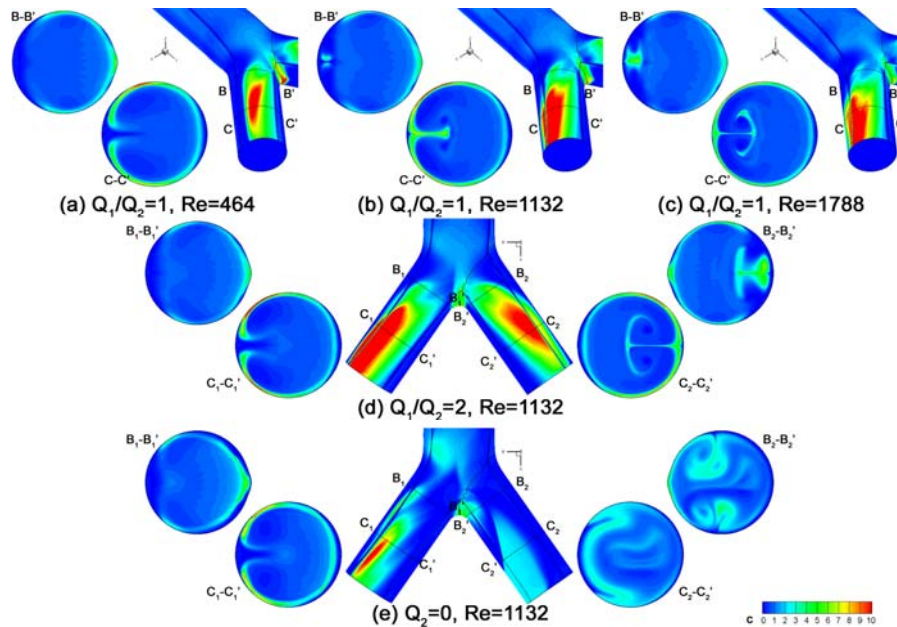
Εικόνα 5.5: Συνολικό κλάσμα εναπόθεσης: (a) Συναρτήση του αριθμού Reynolds για συμμετρική ροή. Σύγκριση με τα πειραματικά αποτελέσματα των Kim et al. (1994), και (b) Σύγκριση συμμετρικής και ασύμμετρων ροών για $Re=1132$.

Το συνολικό κλάσμα εναπόθεσης δεν εξαρτάται ιδιαίτερα από τον αριθμό Reynolds της ροής στην περίπτωση συμμετρικής ροής (Εικ.5.5(a)). Το αποτέλεσμα αυτό είναι σε συμφωνία με τα πειραματικά ευρήματα των Kim et al. (1994). Επίσης, η εναπόθεση δε μεταβάλλεται ουσιαστικά μεταξύ της συμμετρικής ροής, $Q_1/Q_2 = 1$, και της μερικώς αποφραγμένης ροής, $Q_1/Q_2 = 2$, αλλά είναι σημαντικά χαμηλότερη στην περίπτωση πλήρως αποφραγμένης ροής, $Q_2 = 0$, όπως φαίνεται στην Εικ.5.5(b).

Αν και το συνολικό κλάσμα εναπόθεσης δε μεταβάλλεται ιδιαίτερα με τις διάφορες συνθήκες ροής, οι περιοχές εναπόθεσης και οι κατανομές συγκέντρωσης των σωματιδίων εξαρτώνται από αυτές (Εικ.5.6).

Σε όλες τις περιπτώσεις υπάρχει εναπόθεση σωματιδίων στην κορυφή της διακλάδωσης, αλλά και μια περιοχή ελεύθερη σωματιδίων στο εξωτερικό τοίχωμα στην

έναρξη των θυγατρικών αγωγών απέναντι από την κορυφή της διακλάδωσης. Οι θέσεις εναπόθεσης στους θυγατρικούς αγωγούς κινούνται από την πάνω πλευρά του αγωγού προς την εξωτερική και προς την έξοδο του καθώς ο αριθμός Reynolds αυξάνει. Στην περίπτωση $Q_2 = 0$ βρέθηκε ότι τα σωματίδια παγιδεύονται και τελικά επικάθονται ακόμα και στον αποφραγμένο θυγατρικό αγωγό.



Εικόνα 5.6: Κατανομές συγκέντρωσης σωματιδίων στις διατομές κατάντι της διακλάδωσης και περιοχές εναπόθεσης στο τοίχωμα της PRB για σωματίδια μεγάλου αριθμού Stokes: (a) $Q_1/Q_2=1, Re=464$, (b) $Q_1/Q_2=1, Re=1132$, (c) $Q_1/Q_2=1, Re=1788$, (d) $Q_1/Q_2=2, Re=1132$, και (e) $Q_2=0, Re=1132$.

Την τελευταία δεκαετία με τη μεγάλη ανάπτυξη της Νανοτεχνολογίας, υπάρχει αυξημένο επιστημονικό ενδιαφέρον για την χρήση μαγνητικών νανοσωματιδίων (magnetic nanoparticles - MNPs) σε μια πλειάδα βιοϊατρικών εφαρμογών, επειδή επιδεικνύουν πολλά επιθυμητά χαρακτηριστικά. Τα MNPs μπορούν να συνδέονται με φάρμακα, πρωτεΐνες, ένζυμα, αντισώματα και νουκλεοτίδια και στη συνέχεια να κατευθύνονται υπό την επίδραση ισχυρών μαγνητικών πεδίων σε κάποιο όργανο ή να θερμαίνονται με χρήση εναλλασσόμενου μαγνητικού πεδίου για θεραπείες υπερθερμίας (Gupta and Gupta, 2005). Ανάμεσα στις διάφορες προτεινόμενες βιοϊατρικές εφαρμογές των MNPs, υπάρχουν εφαρμογές για τη διάγνωση και θεραπεία του καρκίνου (Cengelli et al., 2010; Grimm and Scheinberg, 2011; Grobmyer et al., 2011; Prijic and Sersa, 2011; Yallapu et al., 2011), θεραπείες με βλαστικά κύτταρα (Iancu et al., 2009), προηγμένα συστήματα μεταφοράς φαρμάκων (Duran et al., 2008; Kumar et al., 2010; Neuberger et al., 2005) και ιατρική απεικόνιση (Lanza et al., 2004; Nahrendorf et al., 2008; Sharma et al., 2006; Sharma and Kwon, 2007; Slevin et al., 2010; Thorek et al., 2006).

Η πλειοψηφία των μελετών αυτών αφορούν MNPs που βρίσκονται διασκορπισμένα στο αίμα, και όχι στον αέρα. Για το λόγο αυτό, στο παρόν Κεφάλαιο, το μοντέλο κατά Euler που αναπτύχθηκε χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη της μεταφοράς και εναπόθεσης μαγνητικών σωματιδίων διασκορπισμένων σε υγρό μέσο υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Επειδή η επίδραση στα σωματίδια είναι αποτέλεσμα των μη μηδενικών χωρικών παραγώγων του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου, ο αντίστοιχος μηχανισμός εναπόθεσης ονομάζεται μαγνητοφόριση (σε αναλογία με τη θερμοφόριση ή την ηλεκτροφόριση).

6.1 ΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΔΥΝΑΜΗ ΣΕ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ

Η μαγνητική δύναμη σε ένα μικρό σωματίδιο μπορεί να θεωρηθεί ίση με τη δύναμη που ασκείται σε ένα σημειακό μαγνητικό δίπολο ροπής \vec{m} (Hallmark et al., 2010), και δίνεται από τη σχέση:

$$\vec{F}_m = (\vec{m} \cdot \nabla) \vec{B}, \quad (6.1)$$

η οποία δηλώνει ότι η μαγνητική δύναμη \vec{F}_m προκύπτει από τη διαφόριση της μαγνητικής επαγωγής \vec{B} στην κατεύθυνση της μαγνητικής ροπής \vec{m} . Πρέπει να τονιστεί ότι απαιτείται ένα μη ομοιόμορφο πεδίο μαγνητικής επαγωγής ώστε να ασκηθεί μη-μηδενική μαγνητική δύναμη στο σωματίδιο.

Θεωρώντας ότι το σωματίδιο μαγνητίζεται ομοιόμορφα σε όλο του τον όγκο V_p και ότι το φέρον ρευστό είναι ισοτροπικό και ελαφρά διαμαγνητικό υλικό, όπως το νερό και ο αέρας, δηλαδή η μαγνητική του διαπερατότητα είναι αυτή του κενού $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ T m / A}$, τότε η Εξ.(6.1) γράφεται ως:

$$\vec{F}_m = \frac{V_p \chi}{\mu_0} (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{B}. \quad (6.2)$$

Αν το μαγνητικό πεδίο είναι στατικό και δεν υπάρχουν ρεύματα στο ρευστό, τότε η εξίσωση Maxwell δίνει $\nabla \times \vec{B} = 0$, οπότε ισχύει $(\vec{B} \cdot \nabla) \vec{B} = 1/2 \vec{B} \cdot \vec{B} = 1/2 B^2$, όπου $B = |\vec{B}|$. Επομένως, η Εξ.(6.2) γίνεται:

$$\vec{F}_m = V_p \chi \nabla \left(\frac{B^2}{2\mu_o} \right), \quad (6.3)$$

ή χρησιμοποιώντας τη σχέση μαγνητικής επαγωγής και μαγνητικού πεδίου, $\vec{B} = \mu_o \vec{H}$:

$$\vec{F}_m = \mu_o V_p \chi \nabla \left(\frac{H^2}{2} \right). \quad (6.4)$$

Η μαγνητική επιδεκτικότητα χ στις προηγούμενες εξισώσεις, μπορεί να αποτελεί και η ίδια συνάρτηση του μαγνητικού πεδίου, δηλαδή $\chi = f(\vec{H})$. Επομένως, η \vec{F}_m αποτελεί, γενικά, μια περίπλοκη χωρική συνάρτηση των εμπλεκόμενων μεγεθών (Zborowski et al., 1999). Το πρόβλημα αυτό αντιμετωπίζεται με τη χρήση απλοποιητικών υποθέσεων ανά περίπτωση.

6.2 ΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ

Η μαγνητική δύναμη, \vec{F}_m , έχει ως αποτέλεσμα τα σωματίδια να κινούνται με μια ‘μαγνητική’ ταχύτητα, ίση προς:

$$\vec{u}_m = \tau_p \vec{F}_m. \quad (6.5)$$

Θεωρώντας ότι τα σωματίδια είναι σφαιρικά, με διάμετρο d_p , και μαγνητίζονται ομοιόμορφα σε όλους τους τον όγκο, $V_p = \pi d_p^3 / 6$, καθώς και ότι το φέρον ρευστό είναι ιστροπικό και ελαφρά διαμαγνητικό (π.χ. νερό ή αέρας), και δεν υπάρχουν ρεύματα στο ρευστό, τότε με χρήση της Εξ.(6.4), η Εξ.(6.5) γράφεται ως:

$$\vec{u}_m = \frac{d_p^2 \chi}{18\mu_f} \nabla \left(\frac{\mu_o H^2}{2} \right). \quad (6.6)$$

Η μαγνητοφορική κινητικότητα των σωματιδίων, $\xi_p [m^3 s / kg]$, ορίζεται ως (Pankhurst et al., 2003; Zborowski et al., 2002):

$$\xi_p \equiv \frac{d_p^2 \chi}{18\mu_f}, \quad (6.7)$$

και εξαρτάται από το μαγνητικό πεδίο \vec{H} ακριβώς με τον ίδιο τρόπο όπως η μαγνητική επιδεκτικότητα χ .

Τελικά, η μαγνητική ταχύτητα των σωματιδίων (Εξ.(6.6)) ισούται με:

$$\vec{u}_m = \xi_p \nabla \left(\frac{\mu_o H^2}{2} \right). \quad (6.8)$$

6.3 ΕΞΙΣΩΣΗ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΤΗ ΜΑΓΝΗΤΟΦΟΡΙΣΗ

Η συνολική ταχύτητα των σωματιδίων υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου ισούται με:

$$\vec{v}_p = \vec{v} + \vec{v}_s + \vec{u}_m - D \nabla \ln c - \tau_p \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} + O(\tau_p^2). \quad (6.9)$$

Η ενσωμάτωση της Εξ.(6.9) στην αδιάστατη μορφή της εξίσωσης μεταφοράς σωματιδίων (PTE), τότε έχουμε:

$$\int_S c \left\{ \bar{v} + St \left[Fr^{-1} \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \hat{g} - 0.5 \bar{v} \cdot \nabla \bar{v} \right] + 0.5 Mn_p \nabla \left(\frac{H^2}{2} \right) \right\} \cdot d\bar{S} = 0.5 Pe^{-1} \int_S \nabla c \cdot d\bar{S}. \quad (6.10)$$

Στην Εξ.(6.10) λαμβάνονται υπόψη ταυτόχρονα η μηχανισμοί της συναγωγής, της διάχυσης, της αδράνειας, της βαρυτικής καθίζησης και της μαγνητοφόρισης των σωματιδίων σε περιγραφή κατά Euler και είναι πρώτης τάξης ως προς τον χρόνο χαλάρωσης των σωματιδίων.

Στην Εξ.(6.10) εμφανίζονται οι ακόλουθοι αδιάστατοι αριθμοί: α) ο αριθμός Stokes, $St = \tau_p \nu_o / r_t$, β) ο αριθμός Peclet, $Pe = r_t \nu_o / D$, και γ) ο αριθμός Froude, $Fr = \nu_o^2 / (r_t g)$. Επιπλέον, εμφανίζεται ένας νέος αδιάστατος αριθμός που σχετίζεται με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, ο οποίος ονομάζεται αριθμός μαγνήτισης των σωματιδίων και δίνεται από τη σχέση:

$$Mn_p = \frac{\mu_o \xi_p H_o^2}{\nu_o r_t}. \quad (6.11)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι ενώ οι αριθμοί Stokes, Peclet και Froude εξαρτώνται μόνο από τα χαρακτηριστικά των σωματιδίων και του ρευστού, ο αριθμός μαγνήτισης μπορεί να είναι χωρική συνάρτηση του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου μέσω της μαγνητοφορητική κινητικότητας των σωματιδίων, ξ_p .

Σχετικά με την Εξ.(6.10), πρέπει να γίνουν οι ακόλουθες επισημάνσεις. Όπως ήδη αναφέρθηκε, στο παρόν Κεφάλαιο, το μοντέλο κατά Euler χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη της μεταφοράς σωματιδίων που βρίσκονται διασκορπισμένα σε υγρό μέσο (κυρίως νερό), και όχι σε αέρα όπως στις προηγούμενες εφαρμογές (Κεφάλαια 4 και 5). Μια από τις κύριες διαφορές μεταξύ ενός συστήματος υγρού-σωματιδίων και ενός αερολύματος είναι ότι η υπόθεση $\rho_f \ll \rho_p$ μπορεί πλέον να μην ισχύει. Για αυτό και στην Εξ.(6.10), χρησιμοποιείται η πλήρης εξίσωση της βαρυτικής καθίζησης και όχι η απλοποιημένη. Πρόσθετα, καθώς ένα υγρό είναι πάντα συνεχές μέσο, ο συντελεστής διόρθωσης Cunningham είναι πάντα ίσος με τη μονάδα (αυστηρότερα, ο C_c δεν χρησιμοποιείται για τα συστήματα υγρού-σωματιδίων). Τέλος, επειδή το ιξώδες του νερού είναι δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από αυτό του αέρα, $\mu_{water} = 1 \times 10^{-3} \text{ kg/ms}$ και $\mu_{water} = 1.81 \times 10^{-5} \text{ kg/ms}$ αντίστοιχα, ο χρόνος χαλάρωσης, ή ισοδύναμα ο αριθμός Stokes, των σωματιδίων θα είναι σημαντικά μικρότερος στο νερό, οπότε και τα αδρανειακά φαινόμενα ασθενέστερα.

6.4 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ

Καθώς ο ρόλος των μαγνητικών μικρο- και νανο-σωματιδίων στην ιατρική γίνεται πιο σημαντικός, αναπτύχθηκε και η μαθηματική και υπολογιστική μοντελοποίηση των εφαρμογών αυτών. Το πεδίο αυτό της έρευνας είναι πολύ ενεργό για περισσότερο από μια δεκαετία και η πολυπλοκότητα των συστημάτων που μοντελοποιούνται αυξάνει συνεχώς.

Οι περισσότερες εργασίες εστιάζουν σε απλές γεωμετρίες ροής και μελετούν την επίδραση διαφόρων μαγνητικών πεδίων στη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων. Υπάρχει μια πλειάδα διδιάστατων εργασιών που βασίζονται σε περιγραφή κατά Lagrange της σωματιδιακής φάσης (Furlani and Ng, 2006; Furlani and Furlani, 2007;

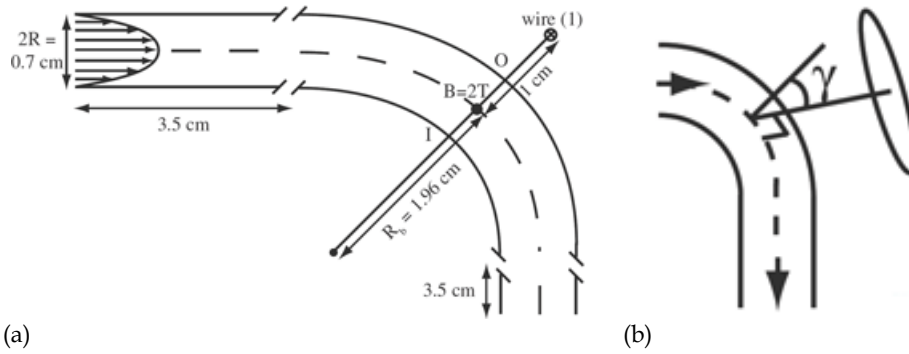
Furlani, 2006, 2007; Rezlescu et al., 1995; Murariu et al., 2001; Rotariu et al., 2005; Rotariu and Strachan, 2005), στις οποίες χρησιμοποιούνται μαγνητικά πεδία από κυλινδρικούς μαγνήτες άπειρου μήκους, συστοιχίες αγωγίων στοιχείων, ένα ή δύο φερομαγνητικά καλώδια σε ομοιόμορφο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Οι Haverkort, Kenjres and coworkers χρησιμοποίησαν εμπορικούς και δικούς τους κώδικες, επίσης σε Lagrangian περιγραφή, για τη μελέτη τριδιάστατης ροής μαγνητικών σωματιδίων. Συγκεκριμένα, εξέτασαν τη σταθερή ροή μαγνητικών σωματιδίων σε ευθύγραμμο αγωγό και γωνιά 90° κυκλικής διατομής, όπου το μαγνητικό πεδίο προέρχεται είτε από ευθύγραμμο ρευματοφόρο αγωγό άπειρου μήκους ή από κυκλικό ρευματοφόρο αγωγό, αλλά και την χρονικά μεταβαλλόμενη ροή σωματιδίων στην αριστερή στεφανιαία αρτηρία και την καρωτίδα όταν το μαγνητικό πεδίο προέρχεται από έναν υπεραγωγίμο κυλινδρικό αγωγό (Haverkort et al., 2009a,b; Haverkort and Kenjres, 2009; Kenjres and Cohen Stuart, 2010; Cohen Stuart et al., 2011). Τα τελευταία χρόνια, οι Chen και συνεργάτες (Chen et al., 2007a,b,c,d, 2008a,b,c; Bockenfeld et al., 2010; Chen et al., 2011) μελετούν πειραματικά και υπολογιστικά (με χρήση εμπορικού κώδικα και Lagrangian περιγραφής), μια φορητή μαγνητική συσκευή διαχωρισμού για την αποτοξίνωση του ανθρώπινου αίματος. Η συσκευή αποτελείται από παράλληλα σωληνάκια, μέσα στα οποία ρέει το ρευστό, και μακριά κυλινδρικά καλώδια με άξονες παράλληλους σε αυτούς των σωλήνων. Ολόκληρη η συσκευή βρίσκεται εντός ομοιόμορφου μαγνητικού πεδίου. Με αυτόν τον τρόπο παράγεται ένα μη-ομοιόμορφο μαγνητικό πεδίο στο κενό των σωλήνων. Αν υπάρχουν μαγνητικά σωματίδια διασκορπισμένα στο υγρό (αίμα) που εισέρχεται από τη συσκευή, τότε η κίνησή τους θα επηρεαστεί από το μαγνητικό πεδίο. Μεταβάλλοντας τις ιδιότητες των καλωδίων, και επομένως του παγωμένου μαγνητικού πεδίου, καθώς και της γεωμετρίας των σωλήνων, τα σωματίδια μπορούν να απομακρυνθούν πλήρως από το ρευστό.

Από τις προαναφερθείσες μελέτες είναι φανερό, ότι η περιγραφή κατά Lagrange χρησιμοποιείται στην πλειοψηφία των εργασιών μαγνητοφόρισης. Αξιοσημείωτες εξαιρέσεις είναι οι εργασίες των Khashan et al. (2011a,b) και Habibi and Ghasemi (2011), οι οποίοι μελέτησαν τη μεταφορά μαγνητικών σωματιδίων υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου χρησιμοποιώντας περιγραφή κατά Euler. Οι εργασίες των Khashan et al. (2011a,b) θεωρούν νευτώνιο ρευστό και διπλή σύζευξη (δηλαδή επίδραση των σωματιδίων στη ροή), ενώ οι εργασίες των Habibi and Ghasemi (2011) θεωρεί μη-νευτώνιο, φερομαγνητικό ρευστό. Αν και οι εργασίες αυτές είναι προχωρημένες με βάση τα φυσικά φαινόμενα που εμπεριέχουν, περιορίζονται σε διδιάστατες ροές.

Στην παρούσα εργασία, το πλήρως μοντέλο κατά Euler χρησιμοποιείται για τη μελέτη της τριδιάστατης μεταφοράς σωματιδίων διασκορπισμένων σε υγρό μέσο. Οι απλές γεωμετρίες και τα μαγνητικά πεδία των Haverkort et al. (2009a) και Chen et al. (2007b, 2008c), που έχουν αναλυτική περιγραφή, χρησιμοποιούνται για προσομοιώσεις και σύγκριση.

6.4.1 Σύγκριση με Haverkort et al. (2009a)

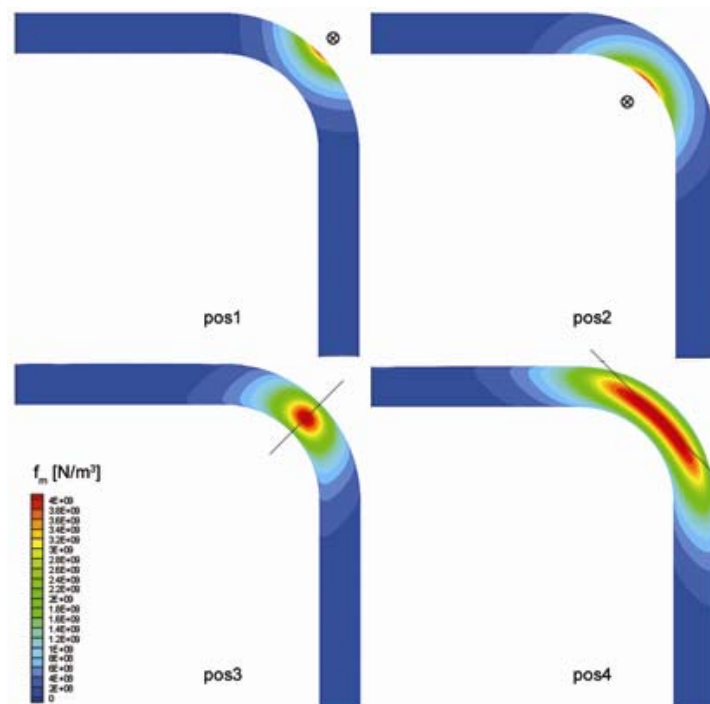
Η αριθμητική εργασία των Haverkort et al. (2009a), και πιο συγκεκριμένα η μελέτη της μαγνητοφόρισης σωματιδίων σε μια γωνιά 90° κυκλικής διατομής, χρησιμοποιείται για σύγκριση. Το μαγνητικό πεδίο προέρχεται από ευθύγραμμο ρευματοφόρο αγωγό άπειρου μήκους ή από κυκλικό ρευματοφόρο αγωγό (Εικ.6.1), και για τα σωματίδια χρησιμοποιείται γραμμικό μοντέλο μαγνήτισης. Οι ιδιότητες των σωματιδίων και του ρευστού δίνονται στον Πίνακα 6.1.



Εικόνα 6.1: Σχηματικό διάγραμμα γεωμετρίας που χρησιμοποιείται από τους Haverkort et al. (2009a). (a) Ευθύγραμμος ρευματοφόρος αγωγός απείρου μήκους - θέση 1 (pos1), και (b) Κυκλικός ρευματοφόρος αγωγός.

Θερμοκρασία Ρευστού T	293K
Πυκνότητα ρευστού ρ_f	1000 kg/m ³
Ιξώδες ρευστού μ_f	1x10 ⁻³ kg/m s
Μέση ταχύτητα ρευστού v_o	0.1 m/s
Διάμετρος αγωγού d_t	7x10 ⁻³ m
Πυκνότητα σωματιδίων ρ_p	6450 kg/m ³
Διάμετρος σωματιδίων d_p	0.25-2.5 μ m
Μαγνητική επιδεκτικότητα χ	3
Αριθμός Dean, De	84.5

Πίνακας 6.1: Ιδιότητες ρευστού και σωματιδίων που χρησιμοποιήθηκαν στη σύγκριση με Haverkort et al. (2009a).



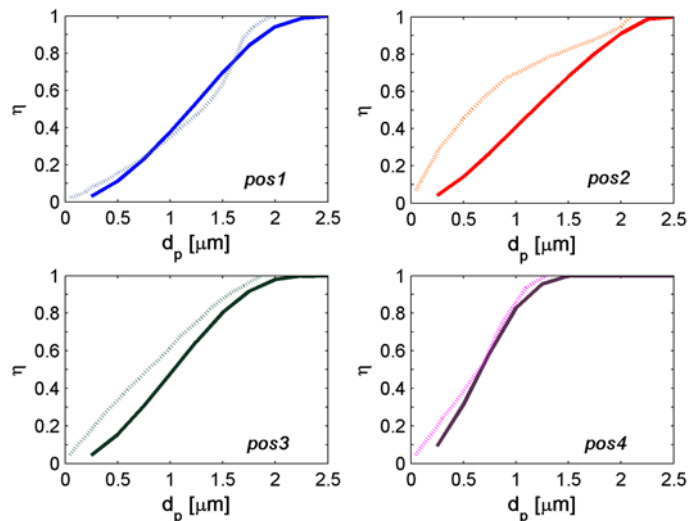
Εικόνα 6.2: Δύναμη μαγνήτισης ανά μονάδα όγκου, f_m [N/m³], για τις διάφορες θέσεις του ευθύγραμμου ρευματοφόρου αγωγού.

Ευθύγραμμος ρευματοφόρος αγωγός απείρου μήκους

Στην περίπτωση αυτή τα σωματίδια θεωρούνται μη-κορεσμένα. Ο ευθύγραμμος ρευματοφόρος αγωγός τοποθετείται με τέσσερις διαφορετικούς τρόπους σε σχέση με τη γωνιά, όπως φαίνεται στην Εικ.6.2. Στην ίδια εικόνα φαίνεται πυκνότητα της

μαγνητικής δύναμης στο τοίχωμα της γωνιάς όπως υπολογίστηκε στην παρούσα εργασία, η οποία είναι της ίδιας τάξης μεγέθους και παρουσιάζει τα ίδια ποιοτικά χαρακτηριστικά με αυτήν των Haverkort et al. (2009a).

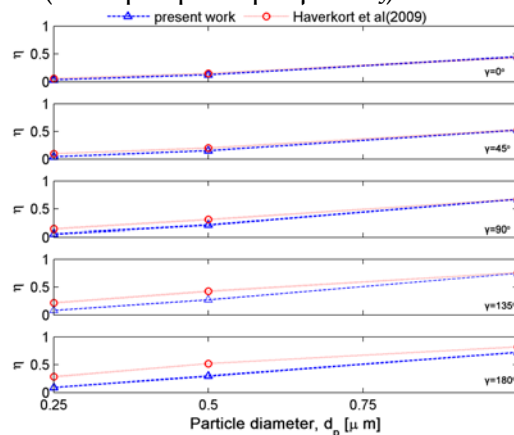
Οι προβλέψεις του μοντέλου κατά Euler για τις διάφορες θέσεις του ρευματοφόρου αγωγού, με βάση το κλάσμα εναπόθεσης, δίνονται στην Εικ.6.3. Τα ευρήματα μας είναι συγκρίσιμα με αυτά της εργασίας αναφοράς, με εξαίρεση τη θέση 2 (pos2) όπου ο ρευματοφόρος αγωγός βρίσκεται στην εσωτερική πλευρά της γωνιάς. Οι διαφορές στην περίπτωση αυτή είναι μεγαλύτερες για τα μικρότερα σωματίδια, αλλά η αιτία της διαφοροποίησης δεν είναι ξεκάθαρη.



Εικόνα 6.3: Κλάσμα εναπόθεσης συναρτήσει της διαμέτρου των σωματιδίων για τις διάφορες θέσεις του ευθύγραμμου ρευματοφόρου αγωγού. Τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας δίνονται με συνεχή γραμμή, ενώ αυτά των Haverkort et al. (2009b) με διακεκομμένη.

Κυκλικός ρευματοφόρος αγωγός

Πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας κυκλικό ρευματοφόρο αγωγό με ακτίνα $a = 1cm$, στον οποίο ρέει ρεύμα $I = 3 \times 10^5 A$, και είναι τοποθετημένος σε απόσταση $1cm$ από το κέντρο του αγωγού στη μέση της γωνιάς, και τα σωματίδια θεωρούνται κορεσμένα ($M_{sat} = 10^6 A/m$). Η γωνία γ μεταξύ του άξονα του κυκλικού ρευματοφόρου αγωγού και του επιπέδου της γωνιάς, κυμαίνεται από $\gamma = 0^\circ$ (εξωτερική πλευρά γωνιάς) ως $\gamma = 180^\circ$ (εσωτερική πλευρά γωνιάς).



Εικόνα 6.4: Κλάσμα εναπόθεσης συναρτήσει της διαμέτρου των σωματιδίων για τις διάφορες θέσεις του κυκλικού ρευματοφόρου αγωγού.

Στην Εικ.6.4, δίνεται το κλάσμα εναπόθεσης σε κάθε θέση του κυκλικού ρευματοφόρου αγωγού δίνεται συναρτήσει της διαμέτρου των σωματιδίων. Η συμφωνία των αποτελεσμάτων της παρούσας εργασίας με αυτά των Haverkort et al. (2009a) είναι άριστη για σωματίδια $1\mu m$ είναι άριστη για $\gamma = 0^\circ - 135^\circ$. Ωστόσο, οι προβλέψεις του μοντέλου κατά Euler διαφέρουν αυτών της εργασίας αναφοράς για σωματίδια $d_p < 1\mu m$ ανεξάρτητα της θέσης του αγωγού. Οι διαφορές είναι μεγαλύτερες καθώς ο αγωγός κινείται από $\gamma = 0^\circ$ προς $\gamma = 180^\circ$.

6.4.2 Σύγκριση με Chen et al. (2007,2008a,b)

Το μοντέλο κατά Euler χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της εναπόθεσης μαγνητικών σωματιδίων σε έναν ευθύγραμμο κυκλικό σωλήνα υπό την επίδραση του μαγνητικού πεδίου. Το πεδίο δημιουργείται από δύο φερομαγνητικά καλώδια εντός ομοιόμορφου μαγνητικού πεδίου. Αυτή η γεωμετρία, που φαίνεται στην Εικ.6.5(a), αποτελεί στην ουσία ένα δομικό στοιχείο της συσκευής που προτείνουν οι Chen and coworker (Chen et al., 2007b,c, 2008b,c). Για τις προσομοιώσεις, θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένο προφίλ ταχύτητας. Οι ιδιότητες του ρευστού, των σωματιδίων, των καλωδίων και του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου στον Πίνακα 6.2. Τα σωματίδια της εργασίας αυτής, παρουσιάζουν υπερ-παραμαγνητική συμπεριφορά.

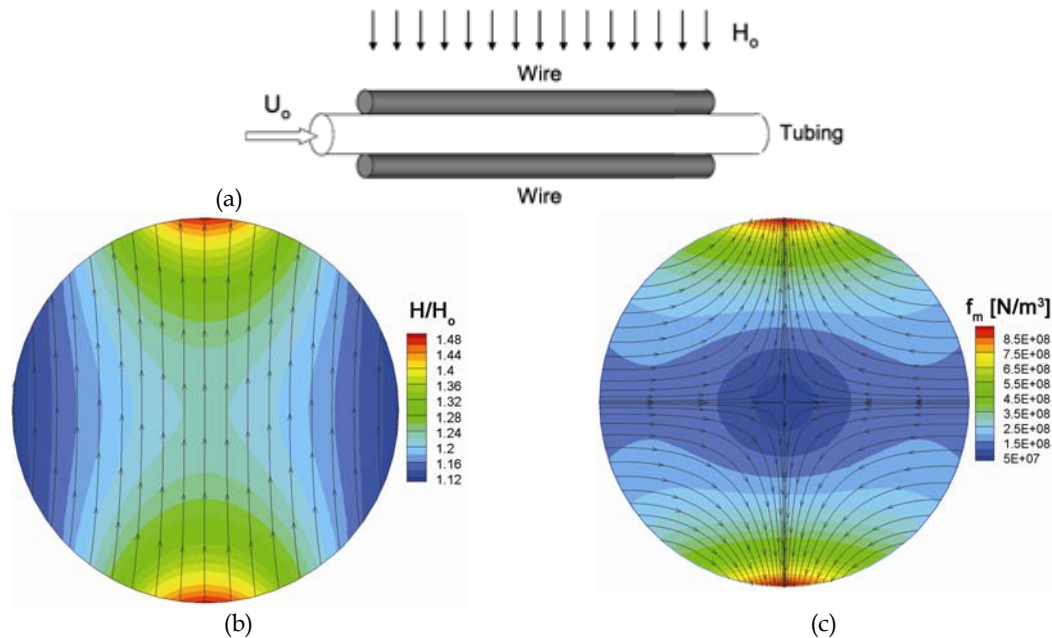
Στην Εικ.6.5(b), φαίνεται σε μια διατομή το αδιάστατο μαγνητικό πεδίο, ένταση και γραμμές ροής, για τις βασικές ιδιότητες. Πρόσθετα, στην Εικ.6.5(c) φαίνεται η πυκνότητα της μαγνητικής δύναμης που ασκείται στα σωματίδια, $f_m [N/m]$ (το μέτρο με τη χρωματική κλίμακα και τη διεύθυνση με τα διανύσματα). Τα αποτελέσματα έχουν καλή σύγκριση, τόσο ποιοτικά όσο και ποσοτικά, με τα αποτελέσματα της εργασίας αναφοράς.

Θερμοκρασία Ρευστού T	298.15 K
Πυκνότητα ρευστού ρ_f	1000 kg/m ³
Ιξώδες ρευστού μ_f	1x10 ⁻³ kg/m s
Μέση ταχύτητα ρευστού v_o	0.14 - 45.0 , 5.0 m/s
Εσωτερική διάμετρος αγωγού d_{tin}	0.75x10 ⁻³ m
Εξωτερική διάμετρος αγωγού d_{tout}	1x10 ⁻³ m
Διάμετρος σωματιδίων d_p	1.7 μm
Μαγνητικό κλάσμα μάζας σωματιδίων $x_{fm,p}$	12.45%
Υλικό FM σωματιδίων	Μαγνητήτης
Πυκνότητα FM σωματιδίων $\rho_{fm,p}$	5050 kg/m ³
Διάμετρος FM σωματιδίων $d_{fm,p}$	10nm
Μαγνήτιση κορεσμού FM σωματιδίων $M_{fm,s}$	4.21x10 ⁵ A/m
Πυκνότητα πολυμερούς $\rho_{pol,p}$	6450 kg/m ³
Υλικό καλωδίου	SS430
Ακτίνα καλωδίου r_w	0.25x10 ⁻³ m
Μαγνήτιση κορεσμού καλωδίων $M_{w,s}$	13.42x10 ⁵ A/m
Μαγνητική επαγωγή $\mu_o H_o$	0.125-0.5 T

Πίνακας 6.2: Ιδιότητες ρευστού, σωματιδίων, καλωδίων και εξωτερικού μαγνητικού πεδίου που χρησιμοποιήθηκαν στη σύγκριση με Chen et al. (2007b). Υπογραμμισμένες είναι οι ιδιότητες της βασικής περίπτωσης.

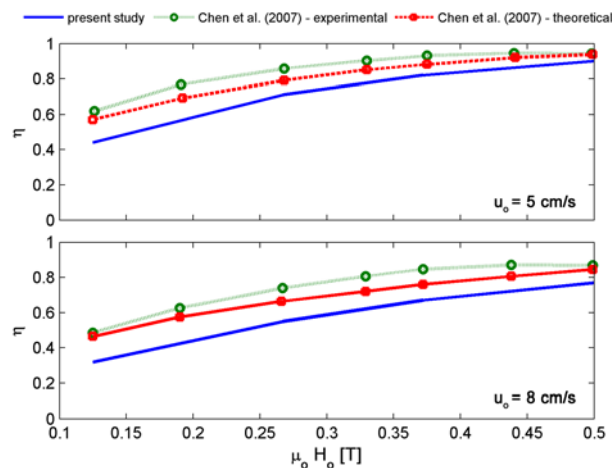
Το κλάσμα εναπόθεσης των σωματιδίων δίνεται στην Εικ.6.6 συναρτήσει τη μαγνητικής επαγωγής $B_o = \mu_o H_o [T]$, για $v_o = 5cm/s$ (πάνω) και $v_o = 8cm/s$ (κάτω). Τα αποτελέσματα του Euler μοντέλου συγκρίνονται με τα πειραματικά και θεωρητικά

ευρήματα των Chen et al. (2007) για τις βασικές ιδιότητες. Το μοντέλο κατά Euler υποεκτιμά την πειραματική εναπόθεση και στις δύο περιπτώσεις, οι διαφορές όμως είναι μεγαλύτερες για την υψηλότερη μέση ταχύτητα ροής. Ωστόσο, παρατηρείται ότι οι διαφορές μειώνονται καθώς το μαγνητικό πεδίο γίνεται ισχυρότερο και στις δύο ταχύτητες ροής.

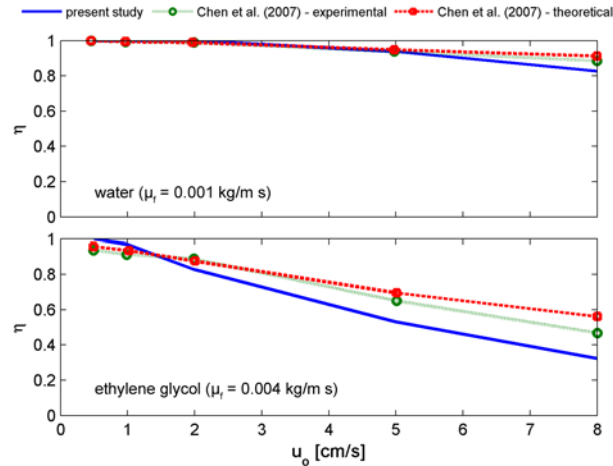


Εικόνα 6.5: (a) Σχηματικό διάγραμμα της πειραματικής διάταξης των Chen et al. (2007b, c). (b) Αδιάστατο μαγνητικό πεδίο, γραμμές ροής και ένταση. (c) Πυκνότητα μαγνητικής δύναμης για τη βασική περίπτωση.

Επιπλέον, η σύγκριση με τα θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα των Chen et al. (2008c) (Εικ.6.7), δείχνει ότι τα αποτελέσματα του μοντέλου κατά Euler συμφωνούν με τις πειραματικές μετρήσεις για ρευστά με χαμηλό ιξώδες, ενώ διαφέρουν από τα πειράματα για $v_0 > 2\text{cm/s}$ στην περίπτωση υγρού με μεγαλύτερο ιξώδες.



Εικόνα 6.6: Κλάσμα εναπόθεσης συναρτήσει της μαγνητικής επαγωγής του πεδίου, $B_0 = \mu_0 H_0$ [T], για $v_0 = 5\text{cm/s}$ (πάνω) και $v_0 = 8\text{cm/s}$ (κάτω). Σύγκριση με τα πειραματικά και θεωρητικά αποτελέσματα των Chen et al. (2007b).



Εικόνα 6.7: Κλάσμα εναπόθεσης συναρτήσει της μέσης ταχύτητας του ρευστού, u_0 [cm/s] ($B_0=0.5T$) για νερό, $\mu_l=0.001$ kg/m s (πάνω), και αιθυλική γλυκόλη, $\mu_l=0.004$ kg/m s (κάτω). Σύγκριση με τα πειραματικά και θεωρητικά αποτελέσματα των Chen et al. (2008c).

Συνολικά, στις περιπτώσεις που εξετάστηκαν, το αναπτυχθέν μοντέλο κατά Euler περιγράφει επιτυχώς τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των πειραματικών καμπυλών: η εναπόθεση αυξάνει με αύξηση του μαγνητικού πεδίου και μείωση της ταχύτητας του υγρού. Οι διαφορές μεταξύ της παρούσας εργασίας και προηγούμενων πειραματικών μελετών, υποδεικνύει ότι ίσως κάποιος μηχανισμός εναπόθεσης που σχετίζεται με το ρευστό είναι παρόν στα πειράματα, και πρέπει να ληφθεί υπόψη στο μοντέλο. Μια εξήγηση για την αυξημένη εναπόθεση στα πειράματα σε σχέση με τους υπολογισμούς, θα μπορούσε να είναι, επίσης, η συνάθροιση των μαγνητικών σωματιδίων υπό την επίδραση του μαγνητικού πεδίου πριν αυτά εναποτεθούν, που θα σήμαινε ότι η ίδια πυκνότητα μαγνητικής δύναμης θα ασκούνταν ουσιαστικά σε μεγαλύτερα σωματίδια αυξάνοντας την επικάθιση στα τοιχώματα.

Η αριθμητική μοντελοποίηση της μεταφοράς σωματιδίων που αιωρούνται διασκορπισμένα σε ρέοντα βιορευστά είναι ο βασικός σκοπός της παρούσας διατριβής. Το κίνητρο για την εργασία αυτή προέρχεται από το αυξημένο επιστημονικό ενδιαφέρον σχετικά με τη συμπεριφορά των μικρο- και νανο- σωματιδίων στο αναπνευστικό και κυκλοφορικό σύστημα. Συγκεκριμένα, διερευνώνται οι μηχανισμοί που διέπουν τις αλληλεπιδράσεις σωματιδίων - ρευστών χρησιμοποιώντας τεχνικές της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής. Η επίλυση της συνεχούς φάσης (ρευστό) γίνεται με χρήση υπάρχοντος CFD κώδικα. Ιδιαίτερη σημασία κατά την ανάπτυξη του μοντέλου δόθηκε στην επίλυση της μεταφοράς των σωματιδίων μέσω μιας μηχανιστικής προσέγγισης. Εντέλει, προβλέπεται ότι με κατάλληλη χρήση και λεπτομερή ανάλυση των αριθμητικών αποτελεσμάτων, το μοντέλο μπορεί να συνεισφέρει στην βαθύτερη κατανόηση της παρατηρούμενης επίδρασης των σωματιδίων στο αναπνευστικό και/ή καρδιαγγειακό σύστημα.

Η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων (PTE) αποτελεί μια ειδική περίπτωση της εξίσωσης ισορροπίας πληθυσμού της σωματιδιακής φάσης, η οποία δεν περιέχει τις εσωτερικές διεργασίες των σωματιδίων (π.χ. πυρηνοποίηση, υγροσκοπική διόγκωση και συνάθροιση). Σε μια περιγραφή κατά Euler (χωρική περιγραφή), η PTE περιγράφει τη μεταφορά των σωματιδίων σε έναν δοθέντα στοιχειώδη όγκο. Η περιγραφή αυτή αντιμετωπίζει άμεσα τη διάχυση των σωματιδίων και επιτρέπει τον ρητό υπολογισμό της συγκέντρωσής τους. Ωστόσο, τα αδρανειακά φαινόμενα δεν μπορούν εύκολα να συμπεριληφθούν στην τυπική μορφή της PTE. Για το λόγο αυτόν, πρέπει να χρησιμοποιηθεί μια προσεγγιστική σχέση για την ταχύτητα των σωματιδίων ώστε να ενσωματωθεί η αδράνειά τους στην περιγραφή κατά Euler.

Στην παρούσα διατριβή, χρησιμοποιείται περιγραφή κατά Euler της ροής ρευστού - σωματιδίων στο όριο του χαμηλού φορτίου μάζας και μικρού κλάσματος όγκου. Θεωρείται μονόπλευρη σύζευξη της σωματιδιακής φάσης, το οποίο σημαίνει ότι η ροή του ρευστού επηρεάζει αυτή των σωματιδίων, αλλά το αντίθετο δεν ισχύει. Η ταχύτητα της σωματιδιακής φάσης που περιέχεται στην PTE, εκφράζεται στο όριο του μικρού χρόνου χαλάρωσης των σωματιδίων. Τελικά, η ταχύτητα των σωματιδίων αποτελείται από έναν όρο διάχυσης, ο οποίος εξαρτάται από την χωρική παράγωγο της συγκέντρωσης των σωματιδίων, και έναν όρο συναγωγής, ανεξάρτητο της συγκέντρωσης.

Η σωματιδιακή ταχύτητα συναγωγής είναι ουσιαστικά η ταχύτητα του φέροντος αερίου διορθωμένη από την ταχύτητα ολίσθησης εξαιτίας της αδράνειας των σωματιδίων και της ολικής εξωτερικής δύναμης που ασκείται στα σωματίδια (π.χ. βαρυτική και/ή μαγνητική). Κατά αυτόν τον τρόπο, τα αδρανειακά φαινόμενα της σωματιδιακής φάσης και η επίδραση εξωτερικών δυναμικών πεδίων ενσωματώνονται στην Eulerian περιγραφή της PTE. Η προαναφερθείσα αντιμετώπιση της PTE και η εφαρμογή της για την περιγραφή της μεταφοράς και εναπόθεσης βαρέων, αδρανειακών σωματιδίων που βρίσκονται διασκορπισμένα σε ρέοντα ρευστά είναι η κύρια καινοτομία της παρούσας διατριβής. Η πλήρως Eulerian Eulerian περιγραφή προσφέρει ξεκάθαρα πλεονεκτήματα:

- Δεν απαιτείται ο δαπανηρός, σε χρόνο και προσπάθεια, υπολογισμός της τροχιάς πληθώρας σωματιδίων για τη λήψη στατιστικά ακριβούς λύσης.

- Λαμβάνει υπόψη ταυτόχρονα τη μεταφορά των σωματιδίων εξαιτίας της διάχυσης και της αδράνειας, και για αυτό είναι κατάλληλη για μεγάλο εύρος μεγέθους σωματιδίων.
- Είναι σχετικά απλή, αφού διαχωρίζει τις εξισώσεις μάζας και ορμής της σωματιδιακής φάσης και η ταχύτητα των σωματιδίων δίνεται σε όρους της ταχύτητας του ρευστού και των χωρικών παραγώγων αυτής.
- Η συγκέντρωση των σωματιδίων υπολογίζεται άμεσα, ως μέρος της επίλυσης της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων.

Η αριθμητική αντιμετώπιση της σωματιδιακής φάσης βασίζεται σε τεχνικές CFD. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιείται μεθοδολογία ανάλογη αυτής που χρησιμοποιείται για ρευστό, επειδή η άμεση σύνδεση των δύο κωδικών είναι επιθυμητή. Για το λόγο αυτόν, η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων επιλύεται στις τρεις διαστάσεις χρησιμοποιώντας μια μεθοδολογία πεπερασμένων όγκων με ομόθετη διάταξη μεταβλητών, η οποία λαμβάνει υπόψη τη μη-ορθογωνιότητα των πλεγμάτων και είναι κατάλληλη για multi-block πλέγματα. Στον κώδικα ο όρος της συναγωγής διακριτοποιείται με χρήση μιας προσέγγισης αναβαλλόμενης διόρθωσης (deferred correction) 2^{ης} τάξης, ενώ ένα σχήμα κεντρικών διαφορών 2^{ης} τάξης χρησιμοποιείται για τον όρο διάχυσης. Επιπλέον, στην παρούσα εργασία προτείνεται και πιστοποιείται η χρήση μιας νέας αριθμητικής προσέγγισης για τη συνοριακή συνθήκη στο τοίχωμα, όπου η συνήθης συνοριακή συνθήκη του πλήρως απορροφητικού τοιχώματος συνδυάζεται με τις ισχυρές ροές συναγωγής προς το τοίχωμα.

Η πιστοποίηση της προτεινόμενης μεθοδολογίας αποδεικνύει ότι η διάχυση και η βαρυτική καθίζηση προβλέπονται με ακρίβεια. Σημαντικότερος είναι πάντως ο έλεγχος της προσεγγιστικής έκφρασης για την ταχύτητα των σωματιδίων στις περιπτώσεις μεγάλων χρόνων χαλάρωσης (ή ισοδύναμα μεγαλύτερων αριθμών Stokes), όπου τα αδρανειακά φαινόμενα είναι σημαντικά και η επίδραση της βαρύτητας δε μπορεί εκ των προτέρων να θεωρηθεί αμελητέα. Τα αποτελέσματα του Eulerian μοντέλου συγκρίνονται, λοιπόν, με αναλυτικά, πειραματικά και αριθμητικά ευρήματα σχετικά με την εναπόθεση αδρανειακών σωματιδίων σε γωνιά 90° κυκλικής διατομής για στρωτή ροή ρευστού.

Συγκεκριμένα, στην περίπτωση που χρησιμοποιείται ένα ιδεατό ροϊκό πεδίο χωρίς δευτερεύουσα ροή, οι προβλέψεις του μοντέλου για χαμηλούς αριθμούς Stokes συμφωνούν με τα αναλυτικά αποτελέσματα, ενώ είναι ελαφρώς αυξημένες για μεγάλους αριθμούς Stokes. Αυτό εξηγείται εύκολα, αν αναλογιστεί κανείς το ότι η δευτερεύουσα ροή δε λαμβάνεται υπόψη στην αναλυτική λύση. Παρ' όλα αυτά, η μέγιστη διαφορά είναι της τάξης του 10% για το μικρότερο λόγο καμπυλότητας της γωνιάς και τείνει στο μηδέν καθώς ο λόγος αυξάνει, γεγονός που καθιστά το μοντέλο κατάλληλο για πρακτικές εφαρμογές. Πρόσθετα, η αναπτυχθείσα προσέγγιση συγκρινόμενη με πειραματικά ευρήματα δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα για το κλάσμα εναπόθεσης στη γωνιά τόσο για χαμηλού όσο και υψηλού αριθμού Dean ροή. Επίσης, οι θέσεις εναπόθεσης των σωματιδίων που προβλέπονται στην παρούσα εργασία συμφωνούν, τουλάχιστον ποιοτικά, με τις πειραματικές παρατηρήσεις. Επομένως, η προσέγγιση που χρησιμοποιείται για τα αδρανειακά φαινόμενα ισχύει για σωματίδια μεγάλης αδράνειας, καθιστώντας την προτεινόμενη μεθοδολογία κατάλληλη για ένα μεγάλο εύρος μεγέθους σωματιδίων και, για αυτό, για μια πλειάδα εφαρμογών.

Μετά τα ικανοποιητικά αποτελέσματα της πιστοποίησης του μοντέλου, αυτό χρησιμοποιείται για να κατανοήσουμε καλύτερα τη φυσική συμπεριφορά αδρανειακών σωματιδίων μέσα σε γωνιά 90° και μια διακλάδωση σύμφωνη με τη φυσιολογία του αναπνευστικού συστήματος. Οι δυο αυτές γεωμετρίες αν και απλές, μπορούν να θεωρηθούν ως δομικά στοιχεία του αναπνευστικού συστήματος. Εστιάζουμε σε βαριά, αδρανειακά σωματίδια ($d_p > 1\mu m$), όπου τόσο τα αδρανειακά φαινόμενα, όσο και η βαρυτική καθίζηση πρέπει να ληφθούν υπόψη.

Αρχικά, εξετάζεται η επίδραση του αριθμού Reynolds και του λόγου καμπυλότητας τόσο στην ροή όσο και στη μεταφορά των σωματιδίων μέσα σε γωνιά 90° . Μελετάται, επίσης, η επίδραση του προσανατολισμού της γωνιάς σε σχέση με την επιτάχυνση της βαρύτητας στην επικάθιση σωματιδίων. Σε όλες τις περιπτώσεις αναφερόμαστε σε βαριά, αδρανειακά σωματίδια ($5\mu m \leq d_p \leq 20\mu m$). Από τα αριθμητικά πειράματα βρήκαμε τα ακόλουθα όσον αφορά τη συνεχή φάση (αέρας):

- Τα χαρακτηριστικά των κατανομών της αξονικής ταχύτητας και της δευτερεύουσας ροής εξαρτώνται από τον αριθμό Dean της ροής, ο οποίος με τη σειρά του είναι συνάρτηση του αριθμού Reynolds και το λόγου καμπυλότητας της γωνιάς.
- Ο λόγος καμπυλότητας επιδρά διαφορετικά στην κατανομή της αξονικής ταχύτητας και στη δομή της δευτερεύουσας ροής για χαμηλούς και υψηλούς αριθμούς Reynolds: για $Re = 100$, η ροή είναι σχεδόν ανεξάρτητη από το λόγο καμπυλότητας της γωνιάς, ενώ για $Re > 500$ η επίδραση του R_o στις κατανομές της ταχύτητας είναι εμφανής. Στη δεύτερη περίπτωση, σχηματίζονται νέες συμμετρικές δίνες καθώς ο λόγος καμπυλότητας μειώνεται (η γωνιά γίνεται πιο απότομη). Ωστόσο, για κανέναν αριθμό Reynolds, η κατανομή της αξονικής ταχύτητας δεν μετακινείται προς το εξωτερικό τοίχωμα της γωνιάς με τη μείωση του R_o .
- Η επίδραση του αριθμού Reynolds στη ροή του ρευστού είναι σημαντική ανεξάρτητα από το λόγο καμπυλότητας. Φαίνεται να υπάρχει ένας ελάχιστος Re , πάνω από τον οποίο το προφίλ της αξονικής ταχύτητας δε μετακινείται περαιτέρω προς το εξωτερικό τοίχωμα της γωνιάς, γεγονός που υποδεικνύει ότι οι αδρανειακές δυνάμεις κυριαρχούν και οι φυγόκεντρες δε μπορούν να επηρεάσουν περισσότερο τη ροή στον αγωγό. Για δεδομένο λόγο καμπυλότητας, αύξηση του αριθμού Reynolds, πρόσθετα της αύξησης των δινών, οδηγεί σε μετατόπιση των δινών της δευτερεύουσας ροής προς το εσωτερικό τοίχωμα της γωνιάς και το επίπεδο συμμετρίας της διατομής.

Όσον αφορά τη σωματιδιακή φάση, βρέθηκαν τα ακόλουθα:

- Η βαρυτική καθίζηση είναι σημαντικός μηχανισμός εναπόθεσης και δεν πρέπει να θεωρείται αμελητέος εκ των προτέρων.
- Ο προσανατολισμός του αγωγού είναι σημαντικότερος για ροές αερολύματος χαμηλού αριθμού Reynolds, όπου τα αδρανειακά φαινόμενα είναι αδύναμα. Για $Re = 100$ και χρησιμοποιώντας ως αναφορά την περίπτωση χωρίς βαρυτική καθίζηση (CDI), το κλάσμα εναπόθεσης για την περίπτωση CDIGx (συναγωγή, αδράνεια, διάχυση και βαρύτητα κατά τον x-άξονα) είναι αισθητά υψηλότερο για όλο το εύρος μεγέθους των σωματιδίων που εξετάστηκε, για την περίπτωση CDIGy (συναγωγή, αδράνεια, διάχυση και βαρύτητα κατά τον y-άξονα) είναι συγκρίσιμο, ενώ για την CDIGz (συναγωγή, αδράνεια, διάχυση και βαρύτητα κατά τον z-άξονα)

είναι υψηλότερο για αριθμούς Stokes μικρότερους της μονάδας και χαμηλότερο για μεγαλύτερα σωματίδια. Για $Re = 1000$, οι περιπτώσεις CDI, CDIG_x και CDIG_y δίνουν παρόμοια κλάσματα εναπόθεσης, ενώ στην CDIG_z η εναπόθεση είναι σημαντικά μικρότερη.

- Για σωματίδια χαμηλού αριθμού Stokes οι κατανομές στη συγκέντρωση δε μεταβάλλονται ιδιαίτερα στις περιπτώσεις CDIG_x και CDIG_y σε σχέση με την CDI τόσο για χαμηλό όσο και για υψηλό αριθμό Reynolds, ενώ για σωματίδια υψηλού αριθμού Stokes υπάρχουν εμφανείς διαφορές μεταξύ των προαναφερθέντων περιπτώσεων (ειδικά για ροές αερολύματος υψηλότερων αριθμών Dean). Στην CDIG_z περίπτωση, η ασύμμετρη συσσώρευση σωματιδίων προς το κατώτερο παράπλευρο τοίχωμα είναι ορατή ακόμα και στα σωματίδια χαμηλού αριθμού Stokes.
- Η επίδραση του αριθμού Reynolds και του λόγου καμπυλότητας της γωνιάς στην αδρανειακή μεταφορά των σωματιδίων εξετάστηκε χωρίς να ληφθεί υπόψη η βαρύτητα (περίπτωση CDI). Το κλάσμα εναπόθεσης αυξάνει με την αύξηση του αριθμού Reynolds, αλλά ο ρυθμός αύξησης μειώνεται. Οι κατανομές της συγκέντρωσης και οι θέσεις εναπόθεσης επηρεάζονται επίσης από τον αριθμό Reynolds, με τις διαφορές να είναι πιο έντονες για τα πιο μεγάλα σωματίδια.
- Ο λόγος καμπυλότητας της γωνιάς είναι σημαντικός για τη μεταφορά των σωματιδίων μόνο για ροές χαμηλού αριθμού Reynolds, όπου η εναπόθεση αυξάνει καθώς ο R_0 μειώνεται, δηλαδή καθώς η γωνιά γίνεται πιο απότομη και τα αδρανειακά φαινόμενα εντονότερα. Επιπλέον, βρέθηκε ότι τα χαρακτηριστικά της κατανομής της συγκέντρωσης και των θέσεων εναπόθεσης δε μεταβάλλονται ιδιαίτερα με το λόγο καμπυλότητας.

Μετά την εξέταση της ακαδημαϊκής περίπτωσης της ροής αερολύματος σε γωνιά 90° , πραγματοποιήθηκαν αριθμητικά πειράματα για την μελέτη της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων εντός διακλάδωσης που συμφωνεί με τη φυσιολογία των γενεών G3-G4 του ανθρώπινου πνεύμονα. Σκοπός ήταν να βρεθεί με πιο τρόπο επηρεάζει το μέγεθος των σωματιδίων και ο αριθμός Reynolds καθώς και η συμμετρία της ροής την εναπόθεση. Τα αποτελέσματα ήταν τα ακόλουθα:

- Το συνολικό κλάσμα εναπόθεσης δεν εξαρτάται ιδιαίτερα από τον αριθμό Reynolds της ροής και δεν αλλάζει σημαντικά μεταξύ συμμετρικής ($Q_1/Q_2 = 1$) και μερικά εμποδιζόμενης ροής ($Q_1/Q_2 = 2$), αλλά είναι σημαντικά χαμηλότερο στην αποφραγμένη ροή ($Q_2 = 0$).
- Οι θέσεις εναπόθεσης και οι κατανομές συγκέντρωσης των σωματιδίων εξαρτώνται από αυτές τις παραμέτρους. Ενώ σε όλες τις περιπτώσεις υπάρχει εναπόθεση σωματιδίων ακριβώς στη διακλάδωση, οι θέσεις εναπόθεσης κατάντι της διακλάδωσης κινούνται προς το εξωτερικό τοίχωμα της PRB και προς την έξοδο των θυγατρικών αγωγών καθώς ο αριθμός Reynolds αυξάνει. Στην περίπτωση $Q_2 = 0$, βρέθηκε ότι σωματίδια παγιδεύονται και τελικά επικάθονται ακόμα και στον αποφραγμένο θυγατρικό αγωγό.

- Σε όλες τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν, υπάρχει μια περιοχή ελεύθερη σωματιδίων στο εξωτερικό τοίχωμα στην έναρξη των θυγατρικών αγωγών, απέναντι από τη διακλάδωση.

Εκτός από λεπτομερή αποτελέσματα στο αναπνευστικό σύστημα, το μοντέλο που αναπτύχθηκε είναι κατάλληλο για σύγχρονες βιοϊατρικές εφαρμογές στο καρδιαγγειακό σύστημα. Συγκεκριμένα, το μοντέλο χρησιμοποιήθηκε για την πρόβλεψη της μεταφοράς και της εναπόθεσης μαγνητικών σωματιδίων που βρίσκονται εντός υγρού μέσου, υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Αρχικά, προσομοιώθηκε η ροή μαγνητικών σωματιδίων - νερού σε γωνιά 90° , σύμφωνα με την αριθμητική μελέτη των Haverkort et al. (2009a). Προέκυψαν τα ακόλουθα συμπεράσματα:

- Στην περίπτωση που το μαγνητικό πεδίο παράγεται από έναν ευθύγραμμο καλώδιο απείρου μήκους, τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας είναι ανάλογα αυτών της εργασίας αναφοράς για όλες τις σχετικές θέσεις γωνιάς - αγωγού, εκτός από την περίπτωση που το καλώδιο βρίσκεται στην εσωτερική πλευρά της γωνιάς.
- Όταν το μαγνητικό πεδίο παράγεται από κυκλικό ρευματοφόρο αγωγό, τα αποτελέσματα του Eulerian μοντέλου συμφωνεί με αυτά της εργασίας αναφοράς για σωματίδια $1\mu m$ και γωνίες 0° ως 135° . Ωστόσο, το μοντέλο προβλέπει χαμηλότερη εναπόθεση για σωματίδια μικρότερα του $1\mu m$, ανεξάρτητα της θέσης του ρευματοφόρου αγωγού, και η διαφορά μεταξύ των εργασιών αυξάνει καθώς ο αγωγός κινείται προς την εσωτερική πλευρά της γωνιάς.

Το μοντέλο επίσης χρησιμοποιήθηκε για να προσομοιωθούν τα πειράματα και οι υπολογισμοί των Chen et al. (2007b, 2008c) και βρέθηκαν τα ακόλουθα:

- Το Eulerian μοντέλο υποτιμά συστηματικά το κλάσμα εναπόθεσης συγκριτικά με τα πειραματικά αποτελέσματα.
- Οι διαφορές είναι μεγαλύτερες για υψηλότερες μέσες ταχύτητες ροής, αλλά μειώνονται καθώς το ένταση του μαγνητικού πεδίου αυξάνει.
- Οι προβλέψεις της παρούσας εργασίας συμφωνούν με τις πειραματικές μετρήσεις στην περίπτωση του ρευστού χαμηλού ιξώδους, αλλά διαφέρουν από τα πειραματικά αποτελέσματα για ροή υψηλότερου ιξώδους.
- Γενικά, το Eulerian μοντέλο περιγράφει επιτυχώς τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των πειραματικών καμπυλών εναπόθεσης στην περίπτωση της μαγνητοφόρισης σωματιδίων που βρίσκονται διασκορπισμένα σε υγρό μέσο: η εναπόθεση αυξάνει με αύξηση της έντασης του μαγνητικού πεδίου και μείωση της ταχύτητας του ρευστού.
- Οι διαφορές μεταξύ της παρούσας εργασίας και των πειραματικών αποτελεσμάτων, υποδεικνύουν ότι κάποιος μηχανισμός εναπόθεσης που είναι παρόν στα πειράματα δε λαμβάνεται υπόψη στις προσομοιώσεις.

Τα προαναφερθέντα αποτελέσματα δείχνουν ότι με την προτεινόμενη μεθοδολογία, η οποία αφορά την ενσωμάτωση των αδρανειακών φαινομένων σε κατά Euler περιγραφή της εξίσωσης μεταφοράς των σωματιδίων και την επίλυση της με τεχνικές CFD, λαμβάνονται σωστές προβλέψεις για τη μεταφορά και εναπόθεση βαρέων,

αδρανειακών σωματιδίων που είναι διασκορπισμένα σε ρέοντα ρευστά. Πρόσθετα, η χρήση του μοντέλου για τον υπολογισμό όχι μόνο των κλασμάτων εναπόθεσης αλλά και των χαρακτηριστικών της εναπόθεσης των σωματιδίων και των κατανομών συγκέντρωσης, προσφέρει βαθύτερη κατανόηση των φυσικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα υπό διάφορες συνθήκες ροής με έναν ευθύ και απλό τρόπο.

Η προτεινόμενη μεθοδολογία είναι αρκετά ευέλικτη ώστε να αντιμετωπίζει τόσο ροές αερολυμάτων (αναπνευστικό σύστημα) όσο και κολλοειδών (κυκλοφορικό σύστημα). Ωστόσο, μπορεί να βελτιωθεί περαιτέρω από την ενσωμάτωση περισσότερων φυσικών φαινομένων που εμπλέκονται στη ροή συστημάτων ρευστού-σωματιδίων. Για παράδειγμα, σημαντική βελτίωση του μοντέλου θα ήταν η ενσωμάτωση της δυναμικής του αερολύματος και, κατ' επέκταση, η επίλυση της γενικής δυναμικής εξίσωσης των σωματιδίων. Αντίστοιχα για τα κολλοειδή, θα μπορούσαν να συμπεριληφθούν στο μοντέλο οι αλληλεπιδράσεις των κολλοειδών, όπως είναι οι αλληλεπιδράσεις εξαιτίας των δυνάμεων van der Waals και/ή του ηλεκτρικού διπλού στρώματος (electrical double layer). Πρόσθετα, το μοντέλο μπορεί να τροποποιηθεί ώστε να λαμβάνει υπόψη μη μόνιμα πεδία ροής. Τέλος, το μοντέλο μπορεί να τροποποιηθεί ώστε να υπολογίζει τη μεταφορά πολυδισεπαρμένων και/ή μη σφαιρικών πληθυσμών σωματιδίων, τα οποία απαντώνται συχνά στην πράξη.

APPENDIX

MAGNETIC FIELD OF FERROMAGNETIC WIRES

WIRE i

Based on the geometry of Fig.54:

$$\begin{aligned} h_{r_i} &= \cos\theta_i \left(1 + K_w \frac{r_w^2}{r_i^2} \right) \hat{r}_i \\ h_{\theta_i} &= \sin\theta_i \left(-1 + K_w \frac{r_w^2}{r_i^2} \right) \hat{\theta}_i \end{aligned} \quad (A.1)$$

where (r_i, θ_i) is the polar system of coordinates defined by wire i . In Eqs.(A.1), the terms $\cos\theta_i$ and $-\sin\theta_i$ are the (dimensionless) components of the external magnetic field \vec{H}_o in the i -polar system.

TWO WIRES

The total magnetic field generated by two FM wires in a uniform external field will be of the form:

$$\vec{H} = \vec{H}_o + \sum_{i=1,2} \vec{H}_i^* \quad (A.2)$$

where \vec{H}_i^* the magnetic field of FM wire i . In order to calculate the radial and angular components of \vec{H} , the expression of the magnetic field of each wire i in the polar coordinate system (r, θ) is needed. The systems of coordinates and the components of vecH in each of them are shown in Fig.56. Neglecting the terms of the external field, Eqs.(A.1) become:

$$\begin{aligned} h_{r_i}^* &= K_w \frac{r_w^2}{r_i^2} \cos\theta_i \\ h_{\theta_i}^* &= K_w \frac{r_w^2}{r_i^2} \sin\theta_i \end{aligned} \quad (A.3)$$

From Fig.(56), it is shown that:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \pi - [(\pi/2 - \theta_1) + (\pi/2 + \theta)] = \theta_1 - \theta \\ \phi_2 &= \pi - [(\pi/2 - \theta) + (\pi/2 + \theta_2)] = -(\theta_2 - \theta) \end{aligned} \quad (A.4)$$

Thus in the (r, θ) system:

$$\begin{aligned} h_r^* &= h_{r_1 r}^* - h_{\theta_1 r}^* + h_{r_2 r}^* + h_{\theta_2 r}^* \\ h_\theta^* &= h_{r_1 \theta}^* + h_{\theta_1 \theta}^* - h_{r_2 \theta}^* + h_{\theta_2 \theta}^* \end{aligned} \quad (A.5)$$

where $h_{r_i r}^* = h_{r_i}^* \cdot \cos\phi_i$, $h_{\theta_i r}^* = h_{\theta_i}^* \cdot \sin\phi_i$, $h_{r_i \theta}^* = h_{r_i}^* \cdot \sin\phi_i$ and $h_{\theta_i \theta}^* = h_{\theta_i}^* \cdot \cos\phi_i$. Taking, also, into account the trigonometric identities:

$$\begin{aligned} \cos(\theta - \theta_i) &= \cos(\theta_i - \theta) \\ \sin(\theta - \theta_i) &= -\sin(\theta_i - \theta) \\ \cos(\theta_i - \theta) &= \cos\theta_i \cos\theta + \sin\theta_i \sin\theta \\ \sin(\theta_i - \theta) &= \sin\theta_i \cos\theta - \cos\theta_i \sin\theta \end{aligned} \quad , \quad (\text{A.6})$$

then, Eqs.(A.5) become:

$$\begin{aligned} h_r^* &= \sum_{i=1,2} [h_{r_i}^* \cos(\theta_i - \theta) - h_{\theta_i}^* \sin(\theta_i - \theta)] \\ h_\theta^* &= \sum_{i=1,2} [h_{r_i}^* \sin(\theta_i - \theta) + h_{\theta_i}^* \cos(\theta_i - \theta)] \end{aligned} \quad . \quad (\text{A.7})$$

Substitution of Eqs.(A.3) in Eqs.(A.5) and using the last two identities of Eqs.(A.6), we get the constituents of the magnetic field created by two FM wires in polar coordinates:

$$\begin{aligned} h_r^* &= K_w r_w^2 \sum_{i=1,2} \frac{\cos(2\theta_i - \theta)}{r_i^2} \\ h_\theta^* &= K_w r_w^2 \sum_{i=1,2} \frac{\sin(2\theta_i - \theta)}{r_i^2} \end{aligned} \quad , \quad (\text{A.8})$$

and, if the external magnetic field is added Eqs.(A.8) becomes:

$$\begin{aligned} h_r &= \left[\cos\theta + K_w r_w^2 \sum_{i=1,2} \frac{\cos(2\theta_i - \theta)}{r_i^2} \right] \hat{r} \\ h_\theta &= \left[-\sin\theta + K_w r_w^2 \sum_{i=1,2} \frac{\sin(2\theta_i - \theta)}{r_i^2} \right] \hat{\theta} \end{aligned} \quad . \quad (\text{A.9})$$

POLAR TO CARTESIAN

From Fig.55, it is seen that:

$$\begin{aligned} h_x &= \cos\theta h_r - \sin\theta h_\theta \\ h_y &= \sin\theta h_r + \cos\theta h_\theta \end{aligned} \quad , \quad (\text{A.10})$$

or, by substitution of Eqs.(A.9):

$$\begin{aligned} h_x &= 1 + K_w r_w^2 \sum_{i=1,2} \frac{\cos(2\theta_i)}{r_i^2} \\ h_y &= K_w r_w^2 \sum_{i=1,2} \frac{\sin(2\theta_i)}{r_i^2} \end{aligned} \quad , \quad (\text{A.11})$$

because

$$\begin{aligned}\cos(2\theta_i) &= \cos^2\theta_i - \sin^2\theta_i \\ \sin(2\theta_i) &= 2\sin\theta_i\cos\theta_i\end{aligned}\quad . \quad (\text{A.12})$$

Moreover, from Fig.56, we get that for wire 1:

$$\begin{aligned}r_1 &= \left|O_1\vec{P}\right| = \sqrt{x^2 + (y + \ell)^2} \\ \cos\theta_1 &= x/r_1 \\ \sin\theta_1 &= (y + \ell)/r_1\end{aligned}\quad , \quad (\text{A.13})$$

whereas for wire 2:

$$\begin{aligned}r_2 &= \left|O_2\vec{P}\right| = \sqrt{x^2 + (y - \ell)^2} \\ \cos\theta_2 &= x/r_2 \\ \sin\theta_2 &= (y - \ell)/r_2\end{aligned}\quad . \quad (\text{A.14})$$

Therefore, for wire 1 it holds that:

$$\begin{aligned}\frac{\cos(2\theta_1)}{r_1^2} &= \frac{\cos^2\theta_1 - \sin^2\theta_1}{r_1^2} = \frac{x^2 - (y + \ell)^2}{(x^2 + (y + \ell)^2)^2} \\ \frac{\sin(2\theta_1)}{r_1^2} &= \frac{2\sin\theta_1\cos\theta_1}{r_1^2} = \frac{2x(y + \ell)}{(x^2 + (y + \ell)^2)^2}\end{aligned}\quad , \quad (\text{A.15})$$

and for wire 2:

$$\begin{aligned}\frac{\cos(2\theta_2)}{r_2^2} &= \frac{\cos^2\theta_2 - \sin^2\theta_2}{r_2^2} = \frac{x^2 - (y - \ell)^2}{(x^2 + (y - \ell)^2)^2} \\ \frac{\sin(2\theta_2)}{r_2^2} &= \frac{2\sin\theta_2\cos\theta_2}{r_2^2} = \frac{2x(y - \ell)}{(x^2 + (y - \ell)^2)^2}\end{aligned}\quad . \quad (\text{A.16})$$

Thus, in Cartesian coordinates the (dimensionless) magnetic field of Eqs.(A.9) is written as:

$$\begin{aligned}h_x &= 1 + K_w r_w^2 \left[\frac{x^2 - (y + \ell)^2}{(x^2 + (y + \ell)^2)^2} + \frac{x^2 - (y - \ell)^2}{(x^2 + (y - \ell)^2)^2} \right] \hat{i} \\ h_y &= K_w r_w^2 \left[\frac{2x(y + \ell)}{(x^2 + (y + \ell)^2)^2} + \frac{2x(y - \ell)}{(x^2 + (y - \ell)^2)^2} \right] \hat{j}\end{aligned}\quad . \quad (\text{A.17})$$

BIBLIOGRAPHY

BIBLIOGRAPHY

- Agnew J., Pavia D., and Clarke S. Aerosol particle impaction in the conducting airways. *Physics in Medicine and Biology*, 29(7):767–777, 1984.
- Annapragada A. and Mishchiy N. In silico modeling of aerosol deposition in lungs. *Drug Discovery Today: Disease Models*, 4:155–161, 2007.
- Armand P., Bouland D., Pourprix M., and Vendel J. Two-fluid modeling of aerosol transport in laminar and turbulent flows. *Journal of Aerosol Science*, 29:961–983, 1998.
- Asgharian B. and Anjilvel S. Inertial and gravitational deposition of particles in a square cross section bifurcating airway. *Aerosol Science and Technology*, 20:177 – 193, 1994.
- Balásházy I. and Hofmann W. Particle deposition in airway bifurcations - I. Inspiratory flow. *Journal of Aerosol Science*, 24:745–772, 1993.
- Balásházy I., Martonen T., and Hofmann W. Inertial impaction and gravitational deposition of aerosols in curved tubes and airway bifurcations. *Aerosol Science and Technology*, 13:308–321, 1990.
- Balásházy I., Hofmann W., and Martonen T. Inspiratory particle deposition in airway bifurcation models. *Journal of Aerosol Science*, 22:15 – 30, 1991.
- Bockenfeld D., Chen H., Kaminski M., Rosengart A., and Rempfer D. A parametric study of a portable magnetic separator for separation of nanospheres from circulatory system. *Separation Science and Technology*, 45:355–363, 2010.
- Breuer M., Baytekin H., and Matida E. Prediction of aerosol deposition in 90° bends using LES and an efficient lagrangian tracking method. *Journal of Aerosol Science*, 37: 1407–1428, 2006.
- Cai F. and Yu C. Inertial and interceptional deposition of spherical particles and fibers in a bifurcating airway. *Journal of Aerosol Science*, 19:679–688, 1988.
- Cengelli F., Voinesco F., and Juillerat-Jeanneret L. Interaction of cationic ultrasmall superparamagnetic iron oxide nanoparticles with human melanoma cells. *Nanomedicine*, 5:1075–1087, 2010.
- Chen H., Bockenfeld D., Rempfer D., Kaminski M., and Rosengart A. Three-dimensional modeling of a portable medical device for magnetic separation of particles from biological fluids. *Physics in Medicine and Biology*, 52:5205–5218, 2007a.
- Chen H., Ebner A., Bockenfeld D., Ritter J., Kaminski M., Liu X., Rempfer D., and Rosengart A. A comprehensive in vitro investigation of a portable magnetic separator device for human blood detoxification. *Physics in Medicine and Biology*, 52:6053–6072, 2007b.
- Chen H., Kaminski M., Caviness P., Liu X., Dhar P., Torno M., and Rosengart A. Magnetic separation of micro-spheres from viscous biological fluids. *Physics in Medicine and Biology*, 52:1185–1196, 2007c.

- Chen H., Kaminski M., Liu X., Mertz C., Xie Y., Torno M., and Rosengart A. A novel human detoxification system based on nanoscale bioengineering and magnetic separation techniques. *Medical Hypotheses*, 68:1071–1079, 2007d.
- Chen H., Bockenfeld D., Rempfer D., Kaminski M., Liu X., and Rosengart A. Preliminary 3-d analysis of a high gradient magnetic separator for biomedical applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 320:279–284, 2008a.
- Chen H., Ebner A., Ritter J., Kaminski M., and Rosengart A. Theoretical analysis of a magnetic separator device for ex-vivo blood detoxification. *Separation Science and Technology*, 43:996–1020, 2008b.
- Chen H., Kaminski M., and Rosengart A. 2D modeling and preliminary in vitro investigation of a prototype high gradient magnetic separator for biomedical applications. *Medical Engineering and Physics*, 30:1–8, 2008c.
- Chen W., Cormode D., Fayad Z., and Mulder W. Nanoparticles as magnetic resonance imaging contrast agents for vascular and cardiac diseases. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology*, 3:146–161, 2011.
- Cheng Y. and Wang C. Inertial deposition of particles in a bend. *Journal of Aerosol Science*, 6(10):139–145, 1975.
- Cheng Y. and Wang C. Motion of particles in bends of circular pipes. *Atmospheric Environment*, 15:301–306, 1981.
- Cheng Y., Zhou Y., and Chen B. Particle deposition in a cast of human oral airways. *Aerosol Science and Technology*, 31:286–300, 1999.
- Cohen Stuart D., Kleijn C., and Kenjeres S. An efficient and robust method for lagrangian magnetic particle tracking in fluid flow simulations on unstructured grids. *Computers & Fluids*, 40:188 – 194, 2011.
- Comer J., Kleinstreuer C., and Kim C. Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. part 2. Aerosol transport and deposition. *Journal of Fluid Mechanics*, 435:55–80, 2001a.
- Comer J., Kleinstreuer C., and Zhang Z. Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. part 1. Air flow fields. *Journal of Fluid Mechanics*, 435:25–54, 2001b.
- Crane R. and Evans R. Inertial deposition of particles in a bent pipe. *Journal of Aerosol Science*, 8:161–170, 1977.
- Cregg P., Murphy K., and Mardinoglu A. Inclusion of interactions in mathematical modelling of implant assisted magnetic drug targeting. *Applied Mathematical Modelling*, 36:1–34, 2012.
- Crowe C. and Michaelides E. Basic Concepts and Definitions. In Crowe C., editor, *Multiphase Flow Handbook*. CRC Press, Boca Raton, 2006.
- Desjardins O., Fox R., and Villedieu P. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. *Journal of Computational Physics*, 227:2514, 2008.

- Drossinos Y. and Housiadas C. Aerosol Flows. In Crowe C., editor, *Multiphase Flow Handbook*. CRC Press, Boca Raton, 2006.
- Drossinos Y. and Reeks M. Brownian motion of finite-inertia particles in a simple shear flow. *Physical Review E*, 71:031113, 2005.
- Duran J., Arias J., Gallardo V., and Delgado A. Magnetic colloids as drug vehicles. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 97:2948–2983, 2008.
- Dusinska M., Fjellsbøl L., Magdolenova Z., Rinna E. A. and Pran, Bartonova A., Heimstad E., Harju M., Tran L., Ross B., Juillerat L., Kenzaoui B., Marano F., Boland S., Guadagnini R., Saunders M., Cartwright L., Carreira S., Whelan M., Kelin C., Worth A., Palosaari T., Burello E., Housiadas C., Pilou M., Volkovova K., Tulinska J., Kazimirova A., Barancokova M., Sebekova K., Hurbankova M., Kovacikova Z., Knudsen L., Poulsen M., Mose T., Vilá M., Gombau L., Fernandez B., Castell J., Marcomini A., Pojana G., Bilanicova D., and Vallotto D. Testing strategies for the safety of nanoparticles used in medical applications. *Nanomedicine*, 4:605–607, 2009.
- Dvonch J., Kannan S., Schulz A., Keeler G., Mentz G., House J., Benjamin A., Max P., Bard R., and Brook R. Acute effects of ambient particulate matter on blood pressure. *Hypertension*, 53:853–859, 2009.
- Farkas A. and Balásházy I. Quantification of particle deposition in asymmetrical tracheo-bronchial model geometry. *Computers in Biology and Medicine*, 38:508–518, 2008.
- Fernandez de la Mora J. and Rosner D. 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, 1982.
- Ferry J. and Balachandar S. A fast Eulerian method for disperse two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 27:1199–1226, 2001.
- Ferziger J. and Perić M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Germany, 3rd edition, 2002.
- Figuerola A., Di Corato R., Manna L., and Pellegrino T. From iron oxide nanoparticles towards advanced iron-based inorganic materials designed for biomedical applications. *Pharmacological Research*, 62:126–143, 2010.
- Finlay W. *The Mechanics of Inhaled Pharmaceutical Aerosols. An Introduction*. Academic Press, Bath, 2001.
- Friedlander S. *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of aerosol dynamics*. Oxford University Press, New York, NY, 2nd edition, 2000.
- Furlani E. Analysis of particle transport in a magnetophoretic microsystem. *Journal of Applied Physics*, 99:1–11, 2006.
- Furlani E. Magnetophoretic separation of blood cells at the microscale. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40:1313–1319, 2007.
- Furlani E. and Furlani E. A model for predicting magnetic targeting of multifunctional particles in the microvasculature. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 312:187–193, 2007.

- Furlani E. and Ng K. Analytical model of magnetic nanoparticle transport and capture in the microvasculature. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 73:0619191–10, 2006.
- Furlani E., Sahoo Y., Ng K., Wortman J., and Monk T. A model for predicting magnetic particle capture in a microfluidic bioseparator. *Biomedical microdevices*, 9:451–463, 2007.
- Gagnadoux F., Hureauux J., Vecellio L., Urban T., Le Pape A., Valo I., Montharu J., Leblond V., Boisdrion-Celle M., Lerondel S., Majoral C., Diot P., Racineux J., and Lemarie E. Aerosolized chemotherapy. *Journal of Aerosol Medicine and Pulmonary Drug Delivery*, 21: 61–70, 2008.
- Garg R., Narayanan C., and Subramaniam S. A numerically convergent Lagrangian-Eulerian simulation method for dispersed two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 35:376, 2009.
- Gawronski R. and Szewczyk K. Inertial deposition of particles in the human branching airways. *Journal of Aerosol Science*, 17:795 – 801, 1986.
- Graetz L. Über die Wärmeleitungsfähigkeit von Flüssigkeiten. Part I. *Annalen der Physik und Chemie*, 18:79–94, 1883.
- Graetz L. Über die Wärmeleitungsfähigkeit von Flüssigkeiten. Part II. *Annalen der Physik und Chemie*, 25:337–357, 1885.
- Grimm J. and Scheinberg D. Will nanotechnology influence targeted cancer therapy? *Seminars in Radiation Oncology*, 21:80–87, 2011.
- Grobmyer S., Morse D., Fletcher B., Gutwein L., Sharma P., Krishna V., Frost S., Moudgil B., and Brown S. The promise of nanotechnology for solving clinical problems in breast cancer. *Journal of Surgical Oncology*, 103:317–325, 2011.
- Gupta A. and Gupta M. Synthesis and surface engineering of iron oxide nanoparticles for biomedical applications. *Biomaterials*, 26:3995–4021, 2005.
- Habibi M. and Ghasemi M. Numerical study of magnetic nanoparticles concentration in biofluid (blood) under influence of high gradient magnetic field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 323:32 – 38, 2011.
- Hallmark B., Darton N., James T., Agrawal P., and Slater N. Magnetic field strength requirements to capture superparamagnetic nanoparticles within capillary flow. *Journal of Nanoparticle Research*, 12:2951–2965, 2010.
- Hatch G. and Stelter R. Magnetic design considerations for devices and particles used for biological high-gradient magnetic separation (HGMS) systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 225:262–276, 2001.
- Haverkort J., Kenjereš S., and Kleijn C. Computational simulations of magnetic particle capture in arterial flows. *Annals of Biomedical Engineering*, 37:2436–2448, 2009a.
- Haverkort J., Kenjereš S., and Kleijn C. Magnetic particle motion in a Poiseuille flow. *Physical Review E*, 80:016302, 2009b.

- Haverkort J. W. and Kenjereš S. Optimizing drug delivery using non-uniform magnetic fields: A numerical study. In Magjarevic R., Nagel J. H., Sloten J., Verdonck P., Nyssen M., and Hauelsen J., editors, *4th European Conference of the International Federation for Medical and Biological Engineering*, volume 22 of *IFMBE Proceedings*, pages 2623–2627. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- Healy D. and Young J. Full Lagrangian methods for calculating particle concentration fields in dilute gas-particle flows. *Proceedings of the Royal Society A*, 461:2197, 2005.
- Heistracher T. and Hofmann W. Physiologically realistic models of bronchial airway bifurcations. *Journal of Aerosol Science*, 26:497–509, 1995.
- Hinds W. *Aerosol Technology: Properties, behavior, and measurement of aerosol particles*. John Wiley and Sons, Inc., USA, 2nd edition, 1999.
- Hofmann W., Golser R., and Balásházy I. Inspiratory deposition efficiency of ultrafine particles in a human airway bifurcation model. *Aerosol Science and Technology*, 37: 988–994, 2003.
- Hournkumnuard K. and Chantrapornchai C. Parallel simulation of concentration dynamics of nano-particles in high gradient magnetic separation. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 19:847 – 871, 2011.
- Housiadas C. and Lazarides M. Inhalation Dosimetry Modelling. In Lazarides M. and Colbeck I., editors, *Human Exposure to Pollutants via Dermal Absorption and Inhalation*. Springer, Netherlands, 2010.
- Iancu C., Ilie I., Georgescu C., Ilie R., Biris A., Mocan T., Mocan L., Zaharie F., Todea-Iancu D., Susman S., Ciuca D., and Biris A. Applications of nanomaterials in cell stem therapies and the onset of nanomedicine. *Particulate Science and Technology*, 27:562–574, 2009.
- Johnston J., Isles K., and Muir D. C. F. *Inertial deposition of particles in human branching airways*. Pergamon Press, Oxford, 1977.
- Jones T. *Electromechanics of particles*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995.
- Kenjereš S. and Cohen Stuart D. C. Computational simulations of magnetic particle capture in simplified and realistic arterial flows: Towards optimized magnetic drug targeting. In Magjarevic R., Nagel J. H., Dössel O., and Schlegel W. C., editors, *World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering, September 7 - 12, 2009, Munich, Germany*, volume 25/4 of *IFMBE Proceedings*, pages 1006–1009. Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- Khashan S., Elnajjar E., and Haik Y. Numerical simulation of the continuous biomagnetic separation in a two-dimensional channel. *International Journal of Multiphase Flow*, 37: 947–955, 2011a.
- Khashan S., Elnajjar E., and Haik Y. CFD simulation of the magnetophoretic separation in a microchannel. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 323:2960–2967, 2011b.
- Kim C. and Fisher D. Deposition characteristics of aerosol particles in sequentially bifurcating airway models. *Aerosol Science and Technology*, 31:198–220, 1999.

- Kim C. and Iglesias A. Deposition of inhaled particles in bifurcating airway models with varying airway geometry. *Journal of Aerosol Medicine*, 2:1–14, 1989.
- Kim C., Fisher D., Lutz D., and Gerrity T. Particle deposition in bifurcating airway models with varying airway geometry. *Journal of Aerosol Science*, 25:567–581, 1994.
- Kleinstreuer C., Zhang Z., and Li Z. Modeling airflow and particle transport/deposition in pulmonary airways. *Respiratory Physiology & Neurobiology*, 163:128 – 138, 2008.
- Kumar A., Jena P., Behera S., Lockey R., Mohapatra S., and Mohapatra S. Multifunctional magnetic nanoparticles for targeted delivery. *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology, and Medicine*, 6:e64–e69, 2010.
- Lanza G., Winter P., Caruthers S., Morawski A., Schmieder A., Crowder K., and Wickline S. Magnetic resonance molecular imaging with nanoparticles. *Journal of Nuclear Cardiology*, 11:733–743, 2004.
- Lawson J., Reeks M., Potts I., and Drossinos Y. On the motion of particles in a laminar flow bend. In Biswas P., Chen D. R., and Hering S., editors, *Proceedings of the 7th International Aerosol Conference*, page 622, Saint Paul, Minesotta, U.S.A., 2006. American Association for Aerosol Research.
- Lee J. and Goo J. Numerical simulation of airflow and inertial deposition of particles in a bifurcation channel of square cross-section. *Journal of Aerosol Medicine*, 5:131–154, 1992.
- Longest P. and Oldham M. Mutual enhancements of CFD modeling and experimental data: A case study of 1 μ m particle deposition in a branching airway model. *Inhalation Toxicology*, 18:761–771, 2006.
- Longest P. and Oldham M. 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, 2008.
- Longest P. and Vinchurkar S. Validating CFD predictions of respiratory aerosol deposition: Effects of upstream transition and turbulence. *Journal of Biomechanics*, 40:305–316, 2007a.
- Longest P. and Vinchurkar S. Effects of mesh style and grid convergence on particle deposition in bifurcating airway models with comparisons to experimental data. *Medical Engineering and Physics*, 29:350–366, 2007b.
- Longest P. and Vinchurkar S. Inertial deposition of aerosols in bifurcating models during steady expiratory flow. *Journal of Aerosol Science*, 40:370–378, 2009.
- Longest P. and Xi J. Computational investigation of particle inertia effects on submicron aerosol deposition in the respiratory tract. *Journal of Aerosol Science*, 38:111–130, 2007.
- Lu A.-H., Salabas E., and Schueth F. Magnetic nanoparticles: Synthesis, protection, functionalization, and application. *Angewandte Chemie - International Edition*, 46:1222–1244, 2007.
- Makris E. and Housiadas C. A methodology to generate a patient specific high quality structured computational domain from medical imaging data. In *Proceedings of the ECCOMAS Thematic International Conference on Simulation and Modeling of Biological Flows (SIMBIO 2011)*, 2011.

- Makris E., Gkanis V., Tsangaris S., and Housiadas C. A methodology to generate structured computational grids from DICOM data: Application to a patient-specific abdominal aortic aneurysm (AAA) model. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 15:173–183, 2011.
- Martonen T., Guan X., and Schreck R. Fluid dynamics in airway bifurcations: III. localized flow conditions. *Inhalation Toxicology*, 13:291–305, 2001a.
- Martonen T., Guan X., and Schreck R. Fluid dynamics in airway bifurcations: II. Secondary currents. *Inhalation Toxicology*, 13:281–289, 2001b.
- Miguel A., Reis A., and Aydin M. Aerosol particle deposition and distribution in bifurcating ventilation ducts. *Journal of Hazardous Materials*, 116:249–255, 2004.
- Mills N., Donaldson K., Hadoke P., Boon N., MacNee W., Cassee F., T.Sandström, Blomberg A., and Newby D. Adverse cardiovascular effects of air pollution. *Nature Clinical Practice Cardiovascular Medicine*, 6:36–44, 2009.
- Misra A., Hickey A., Rossi C., Borchard G., Terada H., Makino K., Fourie P. B., and Colombo P. Inhaled drug therapy for treatment of tuberculosis. *Tuberculosis (Edinb)*, 91:71–81, 2011.
- Mori Y. and Nakayama W. Study on forced convective heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 8:67–82, 1965.
- Murariu V., Rotariu O., Bădescu V., and Bădescu R. Modelling of magnetodensimetric separation in two high gradient magnetic separation axial cells. *Powder Technology*, 116:97–102, 2001.
- Nahrendorf M., Zhang H., Hembrador S., Panizzi P., Sosnovik D., Aikawa E., Libby P., Swirski F., and Weissleder R. Nanoparticle PET-CT imaging of macrophages in inflammatory atherosclerosis. *Circulation*, 117:379–387, 2008.
- Neofytou P. A 3rd order upwind finite volume method for generalised Newtonian fluid flows. *Advances in Engineering Software*, 36:664–680, 2005.
- Neofytou P. and Tsangaris S. Flow effects of blood constitutive equations in 3D models of vascular anomalies. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 51:489–510, 2006.
- Neuberger T., Schoepf B., Hofmann H., Hofmann M., and Von Rechenberg B. Superparamagnetic nanoparticles for biomedical applications: Possibilities and limitations of a new drug delivery system. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 293:483–496, 2005.
- Nusselt W. Die Abhängigkeit der Wärmeübergangszahl von der Rohrlänge. *Verein Deutscher Ingenieure Zeitschrift*, 54:1154–1158, 1910.
- Oldham M., Phalen R., and Heistracher T. Computational fluid dynamic predictions and experimental results for particle deposition in an airway model. *Aerosol Science and Technology*, 32:61–71, 2000.
- Pankhurst Q., Connolly J., Jones S., and Dobson J. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 36:R167–R181, 2003.

- Patankar S. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor & Francis, 1980.
- Plank C. Nanomagnetsols: magnetism opens up new perspectives for targeted aerosol delivery to the lung. *Trends in Biotechnology*, 26:59–63, 2008.
- Prijic S. and Sersa G. Magnetic nanoparticles as targeted delivery systems in oncology. *Radiology and Oncology*, 45:1–16, 2011.
- Pui D., Romay-Novas F., and Liu B. Experimental study of particle deposition in bends of circular cross section. *Aerosol Science and Technology*, 7:300–315, 1987.
- Ramshaw J. Brownian motion in a flowing fluid. *Physics of Fluids*, 22:1595–1601, 1979.
- Rezlescu N., Murariu V., Rotariu O., and Bădescu V. Capture modeling for an axial high gradient magnetic separation filter with a bounded flow field. *Powder Technology*, 83: 259 – 264, 1995.
- Rotariu O. and Strachan N. Modelling magnetic carrier particle targeting in the tumor microvasculature for cancer treatment. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 293: 639–646, 2005.
- Rotariu O., Ogden I., MacRae M., Bădescu V., and Strachan N. An immunomagnetic separator for concentration of pathogenic micro-organisms from large volume samples. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 293:589–596, 2005a.
- Rotariu O., Ogden I., MacRae M., Udrea L., and Strachan N. Multiple sample flow through immunomagnetic separator for concentrating pathogenic bacteria. *Physics in Medicine and Biology*, 50:2967–2977, 2005b.
- Russell A. and Brunekreef B. A focus on particulate matter and health. *Environmental Science and Technology*, 43:4620–4625, 2009.
- Schlesinger R., Bohning D., and Chan T. Particle deposition in a hollow cast of the human trancheobronchial tree. *Journal of Aerosol Science*, 8:429–445, 1977.
- Schmidt F. and Zeldin B. Laminar heat transfer in the entrance region of ducts. *Applied Scientific Research*, 23:73–94, 1971.
- Seinfeld J. and Pandis S. *Atmospheric chemistry and physics: From air pollution to climate change*. John Wiley and Sons, Inc., USA, 1998.
- Shah R. and London A. *Laminar flow forced convection in ducts*. Academic Press, New York, NY, 1978.
- Sharma P., Brown S., Walter G., Santra S., and Moudgil B. Nanoparticles for bioimaging. *Advances in Colloid and Interface Science*, 123-126:471–485, 2006.
- Sharma R. and Kwon S. New applications of nanoparticles in cardiovascular imaging. *Journal of Experimental Nanoscience*, 2:115–126, 2007.
- Simkhovich B., Kleinman M., and Kloner R. Air pollution and cardiovascular injury. epidemiology, toxicology, and mechanisms. *Journal of the American College of Cardiology*, 52:719–726, 2008.

- Slater S. and Young J. The calculation of inertial particle transport in dilute gas-particle flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 27:61–87, 2001.
- Slevin M., Badimon L., Grau-Olivares M., Ramis M., Sendra J., Morrison M., and Krupinski J. Combining nanotechnology with current biomedical knowledge for the vascular imaging and treatment of atherosclerosis. *Molecular BioSystems*, 6:444–450, 2010.
- Stone H. Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 5:530–558, 1968.
- Sung J., Pulliam B., and Edwards D. Nanoparticles for drug delivery to the lungs. *Trends in Biotechnology*, 25:563–570, 2007.
- Thorek D., Chen A., Czupryna J., and Tsourkas A. Superparamagnetic iron oxide nanoparticle probes for molecular imaging. *Annals of Biomedical Engineering*, 34:23–38, 2006.
- Tsai C.-J. and Pui D. Numerical study of particle deposition in bends of a circular cross-section-laminar flow regime. *Aerosol Science and Technology*, 12:813–831, 1990.
- Tsangaris S. *Fluid Mechanics (In Greek)*. Symeon Publications, 1995.
- Weibel E. *Morphometry of the human lung*. Springer-Verlag, 1963.
- Xi J. and Longest P. Evaluation of a drift flux model for simulating submicrometer aerosol dynamics in human upper tracheobronchial airways. *Annals of Biomedical Engineering*, 36:1714–1734, 2008a.
- Xi J. and Longest P. Numerical predictions of submicrometer aerosol deposition in the nasal cavity using a novel drift flux approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51:5562–5577, 2008b.
- Yallapu M., Othman S., Curtis E., Gupta B., Jaggi M., and Chauhan S. Multi-functional magnetic nanoparticles for magnetic resonance imaging and cancer therapy. *Biomaterials*, 32:1890–1905, 2011.
- Yu G., Zhang Z., and Lessmann R. Computer simulation of the flow field and particle deposition by diffusion in a 3-D human airway bifurcation. *Aerosol Science and Technology*, 25:338–352, 1996.
- Yu G., Zhang Z., and Lessmann R. Fluid flow and particle diffusion in the human upper respiratory system. *Aerosol Science and Technology*, 28:146 – 158, 1998.
- Zborowski M., Sun L., Moore L., Stephen Williams P., and Chalmers J. Continuous cell separation using novel magnetic quadrupole flow sorter. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 194:224–230, 1999.
- Zborowski M., Moore L., Williams P., and Chalmers J. Separations based on magnetophoretic mobility. *Separation Science and Technology*, 37:3611–3633, 2002.
- Zhang Z. and Kleinstreuer C. Species heat and mass transfer in a human upper airway model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46:4755–4768, 2003.
- Zhang Z., Kleinstreuer C., and Kim C. Gas-solid two-phase flow in a triple bifurcation lung airway model. *International Journal of Multiphase Flow*, 28:1021–1046, 2002.

- Zhang Z., Kleinstreuer C., Donohue J., and Kim C. Comparison of micro- and nano-size particle depositions in a human upper airway model. *Journal of Aerosol Science*, 36: 211–233, 2005.
- Zhang Z., Kleinstreuer C., and Kim C. Comparison of analytical and CFD models with regard to micron particle deposition in a human 16-generation tracheobronchial airway model. *Journal of Aerosol Science*, 40:16–28, 2009.
- Zhao B., Chen C., and Tan Z. Modeling of ultrafine particle dispersion in indoor environments with an improved drift flux model. *Journal of Aerosol Science*, 40:29–43, 2009.