



**NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY
OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING**

**NUMERICAL SIMULATION OF IMPACTION -
DEPOSITION OF MICRO-NANO PARTICLES IN
INTERNAL COMPLEX GEOMETRY AEROSOL
FLOWS**

DOCTORAL DISSERTATION

EVANGELOS MAKRIS

SUPERVISOR:

S. TSANGARIS
NTUA Professor

ATHENS, MAY 2013



**NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY
OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING**

**NUMERICAL SIMULATION OF IMPACTION -
DEPOSITION OF MICRO-NANO PARTICLES IN
INTERNAL COMPLEX GEOMETRY AEROSOL
FLOWS**

DOCTORAL DISSERTATION

EVANGELOS MAKRIS

PHD SUPERVISORS:

1. S.Tsangaris, NTUA Prof. (supervisor)
2. C.Housiadas, NCSR 'D' Researcher A'
3. J.Anagnostopoulos, NTUA Assoc. Prof

EXAMINATION COMMITTEE:

1. S.Tsangaris, NTUA Prof. (supervisor)
2. C.Housiadas, NCSR 'D' Researcher A'
3. J.Anagnostopoulos, NTUA Assoc. Prof
4. D.Papantonis, NTUA Prof.
5. D.Mathioulakis, NTUA Assoc. Prof.
6. S.Voutsinas, NTUA Assoc. 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, MAY 2013

Acknowledgments

This study 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 to 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. 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. J.Anagnostopoulos, Associate Professor of NTUA, for his remarks on my work. In addition, I would like to thank Dr. Panayotis Neofytou, who helped me significantly in understanding different numerical methods. Moreover I would like to thank Dr. Marika Pilou who helped me greatly during my PhD study with useful discussions considering particle flows and provided me with her CFPD code.

As well as the people mentioned above, a mention must also go to the staff of the Institute of Nuclear & Radiological Sciences & Technology, Energy & Safety of NCSR “Demokritos”, who made it such an interesting and well organized place to work.

*Former Institute of Nuclear Technology and Radiation Protection.

Contents

ACKNOWLEDGMENTS	3
CONTENTS	5
ABSTRACT	7
PUBLICATIONS	9
LIST OF FIGURES AND TABLES	13
INTRODUCTION	19
THEORY	25
2.1 GRID GENERATION FOR COMPLEX GEOMETRIES	26
2.1.1 GRID GENERATION THEORY	27
2.1.2 STRUCTURED GRID GENERATION FROM TRIANGULATED SURFACES OBTAINED BY MEDICAL IMAGING DATA	31
2.1.3 COMPARISONS OF DIFFERENT GRID GENERATION METHODS	41
2.1.4 CONCLUSIONS	48
2.2 PARTICLE TRANSPORT AND DEPOSITION	50
2.2.1 CONTINUOUS PHASE	50
2.2.2 DISPERSED PHASE	51
2.2.3 MODEL VALIDATION	59
2.2.4 CONCLUSION	61
	63
APPLICATIONS	3
3.1 A PATIENT –SPECIFIC ABDOMINAL AORTIC ANEURYSM (AAA) MODEL	64
3.1.1 PATIENT SPECIFIC GEOMETRY AND GRID GENERATION	64
3.1.2 RESULTS OF THE SIMULATION OF THE BLOOD FLOW INSIDE THE AAA	73
3.1.3 COMPARISON OF THE SHEAR STRESS ESTIMATION FROM DIFFERENT GRID TYPES	77
3.1.4 CONCLUSIONS	78
3.2 GENERATION OF MULTI-BLOCK COMPUTATIONAL STRUCTURED GRIDS FROM MEDICAL IMAGING OF ARTERIAL BIFURCATION	80
3.2.1 PATIENT SPECIFIC GEOMETRY AND GRID GENERATION	80
3.2.2 SIMULATION OF THE FLOW FIELD INSIDE A PATIENT SPECIFIC ILIAC BIFURCATION	86
3.2.3 COMPARISON OF CURRENT METHODOLOGY WITH COMMERCIAL UNSTRUCTURED GRID APPROACH.	90
3.2.4. CONCLUSIONS	94
3.3 PARTICLE TRANSPORT AND DEPOSITION UNDER HIGH FREQUENCY OSCILLATORY VENTILATION AND NORMAL BREATHING	97
3.3.1 AIR FLOW UNDER HIGH FREQUENCY OSCILLATORY FLOW FIELDS	97
3.3.2 PARTICLE TRANSPORT AND DEPOSITION UNDER HIGH FREQUENCY OSCILLATORY FIELDS	98
3.3.3 GEOMETRY AND GRID OF A PHYSIOLOGICALLY REALISTIC BIFURCATION (PRB)	99
3.3.4 SIMULATION OF PARTICLE TRANSPORT AND DEPOSITION UNDER HIGH FREQUENCY OSCILLATORY VENTILATION AND NORMAL BREATHING.	100
3.3.5 CONCLUSIONS	107

CONCLUSIONS	4	109
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ		117
ΠΕΡΙΛΗΨΗ		119
ΕΙΣΑΓΩΓΗ	1	121
ΘΕΩΡΙΑ	2	127
2.1 ΓΕΝΕΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΣΕ ΠΟΛΥΠΛΟΚΕΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ		128
2.1.1 ΘΕΩΡΙΑ ΓΕΝΕΣΗΣ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ		128
2.1.2 ΓΕΝΕΣΗ ΔΟΜΗΜΕΝΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΑΠΟ ΤΡΙΓΩΝΙΚΕΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ ΙΑΤΡΙΚΗΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗΣ		131
2.1.3 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ		136
2.2 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ		137
2.2.1 ΣΥΝΕΧΗΣ ΦΑΣΗ		137
2.2.2 ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΦΑΣΗ		137
2.2.3 ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕΘΟΔΟΥ		142
2.2.4 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ		143
		145
ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ	3	
3.1 Ένα εξατομικευμένο μοντέλο ανευρύσματος κοιλιακής αορτής (ΑΚΑ)		146
3.1.1 Εξατομικευμένες πραγματικές γεωμετρίες και γενεση πλεγματος		149
3.1.2 Αποτελέσματα από την προσομοίωση ροής αίματος εντός του ΑΚΑ		153
3.1.4 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ		154
3.2 ΓΕΝΕΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΣΕ ΜΙΑ ΕΞΑΤΟΜΙΚΕΥΜΕΝΗ ΠΡΑΓΜΑΤΙΚΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ ΑΠΟ ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΙΑΤΡΙΚΗΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗΣ		154
3.2.1 ΕΞΑΤΟΜΙΚΕΥΜΕΝΗ ΠΡΑΓΜΑΤΙΚΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ ΚΑΙ ΓΕΝΕΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ		157
3.2.3 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΜΕ ΜΗ ΔΟΜΗΜΕΝΑ ΠΛΕΓΜΑΤΑ.		161
3.2.4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ		162
3.3 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΥΠΟ ΠΕΔΙΟ ΡΟΗΣ ΥΨΙΣΥΧΝΟΥ ΤΑΛΑΝΤΕΥΤΙΚΟΥ ΑΕΡΙΣΜΟΥ ΚΑΙ ΦΥΣΙΟΛΟΓΙΚΗΣ ΑΝΑΠΝΟΗΣ		162
3.3.1 ΡΟΗ ΑΕΡΑ ΥΠΟ ΠΕΔΙΟ ΡΟΗΣ ΥΨΙΣΥΧΝΟΥ ΤΑΛΑΝΤΕΥΤΙΚΟΥ ΑΕΡΙΣΜΟΥ		163
3.3.2 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΥΠΟ ΠΕΔΙΟ ΡΟΗΣ ΥΨΙΣΥΧΝΟΥ ΤΑΛΑΝΤΕΥΤΙΚΟΥ ΑΕΡΙΣΜΟΥ		163
3.3.3 ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΚΑΙ ΠΛΕΓΜΑ		164
3.3.4 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ.		168
3.3.5 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ		171
		177
ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	4	
REFERENCES		

Abstract

The numerical simulation of impaction – deposition of micro-nano particles in internal complex geometry aerosol flows is the main objective of this dissertation. In order to numerically approach the physical problem of particle transfer and deposition in internal aerosol flows of complex geometries, one has to deal with the challenge of creating a complex geometrical computational domain that permit a numerical simulation to be efficiently performed. Furthermore the particular Particle Differential Equations (PDEs) describing particle transport and deposition in an accurate, elaborated and physically valid way have to be formulated and solved, as a rule numerically. In this study a new method that produces a high quality structured grid, which faithfully reproduces the geometry of the human organs, starting from medical imaging data is proposed. Furthermore, the investigation of the mechanisms that govern particle transport and deposition by using techniques of fluid mechanics and the introduction of a further improvement to an existing transport and deposition particle model is done.

Regarding the challenge of the complex geometrical computational domains, a number of studies used patient specific geometries to simulate in vivo flows by means of Computational Fluid Dynamics (CFD) analysis. These studies may be classified according to two basic criteria, namely the type of the computational domain used and the geometrical accuracy between the computational and the physical domain. The majority of these studies starting from medical imaging data produce an unstructured computational domain that conforms to the geometry of the human organ. However, a number of studies, including this study, have shown that unstructured grids provide less accurate solutions than structured grids.

An innovation of this thesis is the introduction of a new method that produces a structured grid with absolute fidelity to the particular patient specific geometry. Starting from data obtained from a medical imaging examination, a surface triangulation is formed in an STL format. From this surface triangulation a high quality multi-block structured grid that conforms to the surface is generated. The proposed method is applicable to vessel bifurcation geometries inside the human body and generates high quality computational domains that can be combined with computational fluid dynamics (CFD) and computational fluid particle dynamics models (CFPD). For the evaluation of the proposed method a series of comparisons between different types of computational domains (unstructured grids and hybrid) were carried out. These comparisons confirmed the superiority of structured grid on many levels.

Regarding the modelling of particle transport and deposition, it should be noted that it tends to be a necessity, especially in situations where direct experimental studies are limited in the determination of the total deposition and in cases where experimental studies are either prohibited due to ethical reasons or impossible due to extremely complex flow fields.

In this thesis a model of computational fluid and particle dynamics previously proposed is developed further in order to simulate time depending particles flows. In the proposed two-phase (fluid – particles) model the solution of the Particle Transfer Equation (PTE) is done by a fully Eulerian approach based on computational fluid dynamics methods for the fluid and the particulate phase. The validation of the newly imported term of the

time variation is achieved by the comparison with a problem that has analytical solution, while the incorporation of particle inertia in the Particle Transfer Equation (PTE) is done according to a previously developed and validated model. Overall the advantages of the Euler approach, combined with the newly imported term of time variation produce a powerful computational tool that may provide insight for particle transport and deposition under time depended flows and may contribute in the interpretation of the behaviour of particle flows inside the respiratory system.

To our knowledge, the proposed method is the first that enables absolute shape conforming structured grid generation of a patient-specific complex geometrical shape starting from medical imaging data. Additionally this is the first time that the transport and deposition of heavy, inert particles are predicted under time depended flows using an Eulerian formalism of the particles transport equation.

As shown in a number of practical applications that we have undertaken, the proposed grid generation method generates high quality computational domains, applicable to complex geometries of human organs, which combined with CFD and CFPD models, can provide an accurate, patient specific framework, for medical diagnosis and prognosis. Furthermore the combination of the efficient grid generation method with the particle transport and deposition Eulerian model can contribute to the interpretation of particle transport and deposition under highly time depended flows in the respiratory system, offering 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 European and International Conferences:**

1. Makris E.,Gkanis V., Housiadas C. “A methodology to use the flow field from Ansys CFX® software in an in-house sectional aerosol dynamics code. *Proceedings of the European Aerosol Conference*, Karlsruhe, Germany, 2009.
2. Makris E.,Tsangaris S., Housiadas C. “A Methodology to Generate a Patient Specific High Quality Structured Computational Domain from Medical Imaging Data. *Proceedings of SIMBIO 2011, Simulation and Modeling of Biological Flows conference* , Brussels, Belgium, 2011.
3. Makris E.,Neofytou P.,Tsangaris S., Housiadas C. “A Semi-Automated Patient Specific CFD Analysis Framework for Cardiovascular System Simulations” *Proceedings of the 10th International Workshop on Biomedical Engineering*, Kos island, Greece, 2011.
4. Pilou M., Antonopoulos V.,Makris E., Neofytou P., Tsangaris S., Housiadas C. “Computational Study of Particle Deposition in a Physiologically Realistic Bifurcation” *Proceedings of NanoImpactNet – QNano conference*, Dublin, Ireland, 2012.
5. Makris E. A patient-specific structured grid generation method, quality assessment and comparisons. *Proceedings of CREST Workshop Recent Developments of Mesh Generation and Biofluids*, Tokyo, Japan, 2012.
6. Pilou M, Makris E, Neofytou P, Tsangaris S , Housiadas C, “Computational study of aerosol flow in a physiologically realistic bifurcation under the influence of an external magnetic field. *Proceedings of the European Aerosol Conference*, Granada, Spain, 2012.
7. Makris E, Pilou M, Neofytou P, Tsangaris S, Housiadas C, “Particle deposition under transient high frequency ventilation air flow in a physiologically realistic bifurcation” *Proceedings of the European Aerosol Conference*, Granada, Spain, 2012.

Peer Reviewed Journals:

1. Makris E.,Gkanis V.,Tsangaris S., 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(2):173-183, 2012.

2. Makris E., Gkanis V., Tsangaris S., Housiadas C. A novel method for the generation of multi-block computational structured grids from medical imaging of arterial bifurcations. *Medical Engineer and Physics*, 34(8):1157–1166, 2012.
3. Makris E., Pilou M., Neofytou P., Tsangaris S. and Housiadas C. A Semi-Automated Patient Specific Computational Fluid and Particle Dynamics Analysis Framework for Biofluid Simulations. *Pliroforiki*, 23 July :36 – 42, 2012.
4. Pilou M., Antonopoulos V., Makris E., Neofytou P., Tsangaris S., Housiadas C. A Fully Eulerian Approach to Particle Inertial Deposition in a Physiologically Realistic Bifurcation. *Applied Mathematical Modelling*, 37(8):5591–5605, 2013
5. Makris E., Pilou M., Neofytou P., Tsangaris S., Housiadas C. Particle Transport and Deposition under High Frequency Oscillatory Ventilation and Normal Breathing. (Under review)

List of Figures and Tables

Figures

Figure 2.1: A typical structured grid

Figure 2.2: A typical unstructured grid

Figure 2.3: a) The triangulated surface representing a part of a human vessel and b) the closed surface separated to two open manifolds

Figure 2.4: a) A surface triangulation and b) an isomorphic planar triangulation produced by the proposed algorithm.

Figure 2.5: a) The planar triangulation produced by the use of the uniform parametrization, b) The planar triangulation produced by the use of the weighted parametrization.

Figure 2.6: A detail of two overlapping planar triangulations. The Blue colored is the triangulation formed by the uniform parametrization while the Red colored is the triangulation formed by the weighted parametrization.

Figure 2.7: a) The planar triangulation b) The planar structured grid c) The overlapping of the structured grid over the planar triangulation

Figure 2.8: An example case for the calculation of the barycentric coordinates for a vertex P inside a triangle

Figure 2.9: a) The initial triangulated surface b) The initial surface structured grid produced

Figure 2.10: The one to one union of the two separately generated surface grids

Figure 2.11: a) The inner grid produced with large clustering distance b) The inner grid produced with small clustering distance

Figure 2.12: a) A slice from the initial inner grid b) A slice from the inner grid after the enhancement procedure

Figure 2.13: The structured grid of a patient specific human vessel produced by the methodology

Figure 2.14: Three gradually finer unstructured grids consisted of a) 249.795, b) 705.895 and c) 1.859.036 tetrahedral elements.

Figure 2.15: Three gradually finer hybrid unstructured grids consisted of a) 242.284, b) 607.023 c) 1.598.526 elements

Figure 2.16: Velocity magnitude of 90 geometrical points inside the computational domain calculated by three unstructured grids

Figure 2.17: Velocity magnitude of 90 geometrical points inside the computational domain calculated by three hybrid prismatic grids

Figure 2.18: Contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for the three unstructured a),b),c) and the three hybrid grids d),e),f)

Figure 2.19: Contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for three grids of different type a) Unstructured, b) Hybrid prismatic unstructured and c) Structured.

Figure 2.20: Velocity magnitude of 90 geometrical points inside the computational domain calculated by three different type grids

Figure 2.21: Detail of the contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for three grids of different type a)Unstructured, b) Hybrid prismatic unstructured and c) Structured.

Figure 2.22: Detail of the contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for three grids of different type a)Unstructured, b) Hybrid prismatic unstructured and c) Structured.

Figure 2.23: Detail of the contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for three grids of different type a)Unstructured, b) Hybrid prismatic unstructured and c) Structured.

Figure 2.24: Topology of a control volume of a Cartesian grid

- Figure 2.25:** Thermal boundary layer development in the entrance region of a flat duct with bounding surfaces subjected to a constant heat flux.
- Figure 2.26:** Comparison of numerical and analytical solution of transient Temperature development inside a flat duct with bounding surfaces subjected to a constant heat flux.
- Figure 3.1:** (Left) A typical image of a DICOM data set from medical examination of an AAA case. (Right) The same image with the area of interest highlighted.
- Figure 3.2:** The image of an AAA in STL format created by the 3D Slicer®.
- Figure 2.3:** (a) A surface triangulation . (b) An isomorphic planar triangulation with one-to-one correspondence between nodes, edges and faces.
- Figure 3.3 :** (a) A surface structured mesh which accurately conforms to the surface shape. (b) The surface triangulation .
- Figure 3.4:** (a) The planar triangulation of the left shell of an AAA. (b) The structured mesh calculated in the 2D domain to be interpolated in the planar triangulation.
- Figure 3.5:** (a) The left shell of an AAA taken from an STL file. (b) A surface structured mesh of the shell generated by the proposed methodology.
- Figure 3.6:** A realistic AAA geometry modelled by a structured computational grid generated by the proposed methodology
- Figure 3.7:** (a) A grid slice from the inner of the 3D structured mesh of the AAA that has been modeled. (b) Detail from the outer surface of the same domain. (c) A detail of the same grid slice.
- Figure 3.8:** (a) The unstructured computational domain of the AAA created by the Ansys ICEM CFD® software. (b) The structured computational domain of the AAA created by the proposed methodology.
- Figure 3.9:** (a) Two Planar sections of the AAA along with a velocity contour at the unstructured grid. (b) Planar sections of the AAA along with a velocity contour at the structured grid.
- Figure 3.10:** The Velocity coordinate Y calculated on 180 points for both computational domains.
- Figure 3.11:** The Velocity coordinate X calculated on 180 points for both computational domains.
- Figure 3.12:** (a) A contour of the shear strain rate on the walls of the unstructured domain. (b) A contour of the shear strain rate on the walls of the structured domain.
- Figure 3.14:** (a) Two typical images of a DICOM data set from medical examination of an abdominal bifurcation case. (b) The same images with the area of interest highlighted.
- Figure 3.15:** (a) The STL file containing the abdominal bifurcation geometry visualized with triangles (b) The abdominal bifurcation geometry separated in open manifolds.
- Figure 3.16:** (a) The left manifold that the branch is united. (b) The same manifold with the hole filled with triangles.
- Figure 3.17:** (a) The planar triangulation of the “filled” manifold (b) The planar triangulation with the triangles of the hole removed (c) The planar multi-block grid that is created and the extracted boundary curve of the hole
- Figure 3.18:** (a) The surface structured multi-block domain created (b) the surface structured multi-block domain (c) the second branch created with a one to one matching condition.
- Figure 3.19:** A comparison a) – d) of velocity magnitude for a defined of 100 points fit for the four structured computational domains

Figure 3.20: A comparison of Ansys CFX solver (using two different advection discretization schemes) versus in-house Finite Volume solver. Visualization of the velocity magnitude for 100 points fit the S3 structured computational domain

Figure 3.21: A view of three grids used for the comparison. (a) The structured grid S3 (b)The “coarse” unstructured grid U1. (c) The “fine” unstructured grid U3.

Figure 3.22: A visualization of a coronal planar contour of the velocity magnitudes presented for three computational domains. (a) The structured grid S3 (b)The “coarse” unstructured grid U1. (c) The “fine” unstructured grid U3.

Figure 3.23: A visualization comparison for an axial plane contour of the velocity magnitude in the area near the branch, presented for three computational domains. (a) The structured grid S3 (b)The “coarse” unstructured grid U1. (c) The “fine” unstructured grid U3.

Figure 3.24: Comparison of velocity magnitudes defined at 100 points for the structured grid c) S3 and unstructured grids a) U1,b) U2 and c) U3.

Figure 3.25: The computational domain of the study. a) A multi-block structured grid with the adoption of the “butterfly” topology representing G3 – G4 bifurcation of the human lung, b) an illustration of the internal grid.

Figure 3.26: Colour contour of the dominant velocity magnitude at the plane symmetry of PBR for the HFOV case for four different time phases a)inhalation start, b) inhalation peak, c)flow reversal, d)exhalation peak.

Figure 3.27: Colour contour of the dominant velocity magnitude at the plane symmetry of PBR for the NB case for four different time phases a)inhalation start, b) inhalation peak, c)flow reversal, d)exhalation peak

Figure 3.28: Surface streamlines and secondary velocity contour magnitudes at a plane near the exit of the G3 – G4 bifurcation at the flow reversion phase for a) HFOV and b) NB cases

Figure 3.29: Colour contour of the particle concentration (particle diameter equal to 900nm) on the wall for the HFOV and the NB case at different time phases

Tables

Table 2.1: List of skewness values and an empirical classification of element quality.

Table 2.2: Summary data about the compared computational domains.

Table 3.1: Skewness metric for the 3D structured grid.

Table 3.2: Maximum velocity and shear strain rate computed on the two domains.

Table 3.4: Number of hexahedral elements for the 3D multi – block structured grids.

Table 3.5: Root mean square of the relative error for the four structured grids generated by the methodology.

Table 3.6: Skewness metric (SKM) for the compared computational domains

Table 3.7: The Number of elements and the grid type of the computational domains used in the comparison.

Table 3.8: Relative square error comparison for three consecutively finer computational domains.

Table 3.9: Summary of flow characteristics for HFOV and NB cases.

Table 3.10: Spherical Particle diameters and Stokes number.

Table 3.11: Deposition fraction of all particle sizes used in the simulation presented for HFOV and NB cases.

Introduction

1

In biomechanical applications such as air flow through the respiratory system, particle deposition in the lung, blood flow in the cardiovascular system and flow in the lower urinary tract, direct measurements of the fluid flow fields or particle transfer and deposition is a highly demanding or even impossible task through the current *in vivo* examinations. In addition the prediction of the evolution of physical phenomena that appear on the previously mentioned cases may be difficult to achieve using direct measurement methods. In these fields; Computational Mechanics (CM) contributes to the study and prediction of complex phenomena that develop inside the human body. These days, the simulation of those phenomena *in-silico* is leading to patient specific frameworks, implementing precise reconstruction of human organ geometries achieved with state-of-the-art medical imaging techniques.

In order to numerically approach the physical problem of particle transfer and deposition in internal aerosol flow of complex geometries, one has to deal with the challenge of creating a complex geometrical computational domain that permit a numerical simulation to be efficiently performed, with respect to the underlying physics, and with the accuracy required for the problem. Furthermore the particular Particle Differential Equations (PDEs) describing particle transport and deposition in an accurate, elaborated and physically valid way have to be formulated and solved, as a rule numerically.

Regarding the challenge of the complex geometrical computational domains, a number of studies used patient specific geometries to simulate *in vivo* flows by means of Computational Fluid Dynamics (CFD) analysis, including but not limited to the simulation of blood flow inside the carotid bifurcation [Deshpande 2009; Lee, S. W. et al 2008], the abdominal aorta bifurcation [Long, Q. et al. 1998; Shim M. B. et al 2009; Wolters, B. J. et al 2005], the abdominal aorta aneurysm [Shim et al. 2009; Wolters et al. 2005] and the air flow combined with particle deposition in the respiratory system [Longest P. W. and Vinchurkar S. 2007; Vinchurkar S. and Longest P. W. 2008]. Furthermore CFD has also been employed for the prediction of the blood flow variation after an implantation in the cardiovascular system [Bazilevs, Y., et al. 2009]. All the previously mentioned biomechanical applications include series of branching geometrical shapes responsible for the development of complex phenomena.

It has to be noted that grid generation is a critical part of CFD process. The accuracy of the CFD simulation results, the computational speed and the computational resources used are directly linked to the type and size of the computational domain. Thus, it is important to deeply review the computational domain alternatives and invest in the generation of an efficient grid.

Research studies that generate computational domains based on human geometries may be classified according to two basic criteria, namely the type of the computational domain used and the geometrical accuracy between the computational domain and the physical domain.

A series of studies [Di Martino et al. 2001; Deshpande M.D. et al. 2009; Hammer S. et al. 2009; Lee S. W. et al 2008; Shim M. B. et al. 2009; Antiga L. et al. 2008; Hammer S. et al. 2009; Peiro J. et al 2008; Doyle et al. 2008; 2010] have started from medical imaging data and by using of a commercial, or an in-house, grid generation code have set up an unstructured computational domain. The use of unstructured computational grids is often preferred as they enable effortless grid generation in complex domains combined with strong preservation of the geometrical shape. However, unstructured grids are generally considered to provide less accurate solutions than structured grids due to a number of factors, including poor alignment with the primary flow direction and increased numerical diffusion. Longest and Vinchurkar [Longest, P. W. and Vinchurkar S. 2007] compared the effects on the flow field and the grid convergence of the two grid types for bifurcating

airway models; this involved further comparison with experimental data. This study showed that structured grid domains used for flow simulation in bifurcation geometries are better than their unstructured counterparts because:

- The use of structured grids decreases the level of numerical diffusion,
- Structured grids have one order of magnitude less grid convergence index (GCI), so mesh independence of flow solution is achieved with fewer elements.
- The use of structured grids reduces run times by a factor of 3 compared with unstructured grids.

Similar conclusions are drawn in other studies [Longest P.W. and Vinchurkar S.2008] which point out the importance of the alignment of the control volume gridlines with the dominant flow direction. A more detailed study of the comparison between structured and unstructured grid has been made by Thompson et al. [1999].

Although the superiority of the structured grid domain is clear, only a few studies use structured grids for the modelling of complex geometries. The main reason is the significant time and effort required for the generation of such grids. One of the earlier studies that combined medical imaging data with structured grid generation techniques is the work by Long et. al [1998]. The grid topology suggested by this study, referred to as “butterfly topology”, has been used by many other researchers since then [Vinchurkar S. and Longest P.W. 2008; Longest P.W. and Vinchurkar S.2007; Antiga L. 2002; De Santis G. et al 2010 ; De Santis G. et al. 2011]. The earlier of these studies utilized the computed vessel centerlines, and united slices of planar grid with the sweep method [Long, Q. et al. 1998; Antiga L. et al. 2002]. More recent and more elaborate studies, describe the branching geometry by template parametric planes [De Santis G. et al. 2010;2011] or use Non-Uniform Rational Basis Spline (NURBS) functions [Bazilevs Y. et al 2006;2008] and deform template meshes in order to conform to the geometry description. Furthermore, in a recent study [De Santis G. et al. 2010] of this approach, the authors conclude that a future trend in structured grid generation is the use of a more detailed geometrical shape description such as surface triangulations (e.g. STereoLithography (STL) type surface models). Recently, few studies have addressed the problem of hexahedral mesh generation from STL type surfaces by applying the “butterfly topology” to geometries with multiple outlets [De Santis G. et al. 2011; Trachet B. et al. 2011; Gallo D. et al. 2011]. The common characteristic in these studies is the high quality grid they produce compromised with the disadvantage of an approximate surface representation.

Regarding the challenge of modeling the particle transport and deposition, it has to be noted that particle transfer and deposition in biomedical applications is determined by biological factors such as domain morphology and physical factors such as fluid dynamics, particle properties and deposition mechanics.

A suspension of particles in a fluid is a multiphase 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, referred as aerosol, and the suspension of solid particles into a liquid, referred as colloid. The terms aerosol and colloid refer to both the particles and the carrier fluid, i.e. to the two-phase flow. 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.

Modeling 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 physical phenomena without the need of experiments, and b) it can be used for parametric investigation and optimization of already developed

applications. In most applications the numerical modeling of the particulate phase needs to be combined with the respective numerical modeling of the fluid flow as the whole system is considered as a multi-phase flow system.

A continuously developing approach on the modeling of fluid - particle multi-phase systems are the local scale models where the transport and deposition equations are solved by CFD numerical methods. Local scale models provide information on particle deposition patterns within selected computational domains and have strong physical basis, thus are particularly suitable for simulation of microphysical details of complex aerosol flows in the respiratory system [Housiadas and Lazarides 2010].

The CFD-based local scale 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 modeling, where a moving frame of reference is used, and the Eulerian modeling, where a fixed frame of reference is employed.

A Lagrangian description of the particulate phase has been widely used to determine particle transport and deposition efficiency. Representative Lagrangian numerical investigations of particle transport and deposition due to the particle-inertia have been carried out by Crane and Evans [1977] and by Tsai and Pui [1990]. Tsai and Pui [1990] developed a more realistic approach of a three dimensional flow field in a 90o bend by calculating the fluid flow with an elliptic three dimensional finite-difference code and deposition efficiency by solving the particle equations of motion. Moreover Breuer et al. [2006] simulated particle transport and deposition in a 90o bend of circular cross section using a flow field calculated via Large-Eddy Simulations and Lagrangian particle tracking for the particulate phase.

However, the determination of important quantities as, for example, the local particle concentration pattern [Slater and Young 2001], are particularly difficult to obtain by Lagrangian approaches. Furthermore the presence of the numerical error associated with Lagrangian simulations becomes significant for highly non-uniform spatial distributions of particles since the number of simulated particles in a grid cell decreases thus, the statistical error increases [Garg et al. 2009]. As a result a large number of particle trajectories has to be calculated to minimize statistical error [Desjardins et al. 2008], rendering the Lagrangian approach computationally demanding. Similarly, if Brownian particle diffusion is considered important the number of simulated particle trajectories further increases to minimize the noise that appears from the stochastic particle motion. Recent advances in numerical implementations of Lagrangian method have addressed those issues by introducing improved error estimators to obtain numerically convergent simulations [Garg et al. 2009].

An initial alternative to the Lagrangian particle modeling is the work of Armand et al. [1998] who proposed and validated a fully Eulerian approach that included inertial particle drift in a two fluid model. The particle velocity was calculated by solving numerically the coupled dispersed-phase mass and momentum equations. Furthermore, they approximated the laminar flow in a 90o circular bend by the flow between two curved parallel plates; their results were in good agreement with other experimental [Pui et al. 1987] and numerical [Tsai and Pui 1990] studies. Additional Eulerian approaches have been developed for submicrometer particles. Longest and Oldham [2008] predict particle deposition in a laminar bifurcating flow system for cases in which diffusion and inertia are important for particle deposition by using a fully Eulerian model. Xi and Longest [2008a] extended the fully Eulerian model in order to account aerosol dispersion in turbulent and unsteady flows; furthermore they applied the model to simulate deposition in a realistic model of the trachea bronchial 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 the proposed model, the Eulerian-Eulerian description of a dilute dispersed flow in the limit of low mass loading and a low volume fraction is used. One-way coupling of the dispersed phase is considered and the particle velocity is approximated, by a first order approximation, in the mass conservation equation of the dispersed phase. The proposed particle transport and deposition Eulerian approach offers significant advantages over previous Eulerian two-fluid models that do not decouple the mass and momentum conservation equations of the dispersed phase. Thus, the numerical solution of the particle momentum equation is not required to determine the particle velocity field, as the momentum effects have been considered as a perturbation. As a result, the particle velocity is expressed solely in terms of the fluid velocity and its spatial and temporal derivatives. Furthermore the proposed approach offers significant advantages over the frequently chosen Lagrangian approach, as it can be used for small particle diameters where the particle equations of motion in a Lagrangian approach become numerically insufficient. Additionally, it may be considered as more accurate since it can take into account diffusive and inertial particle transport at the same time.

The present thesis deals with particle transport and deposition, considering bio-fluid flows, in inner complex geometries. The objective of the present thesis is to introduce a new method combining multi-block structured grid generation, that conforms to patient specific complex geometries, with a particle transport and deposition Eulerian approach that offers significant advantages over previously developed particle transport and deposition models.

Starting from data obtained from a medical imaging examination, a surface triangulation is formed in an STL format. From this surface triangulation a high quality multi-block structured grid that conforms to the surface is generated. The proposed method is applicable to vessel bifurcation geometries inside the human body and generates high quality computational domains that can be combined with computational fluid dynamics (CFD) and computational fluid particle dynamics models (CFPD).

Moreover the basic concept of the proposed particle transport and deposition Eulerian approach is the handling of the particle population balance equation (PBE) in an Eulerian description under unsteady fluid and particle flows. The PBE examines aerosol processes (e.g., transport, nucleation, growth, and coagulation) in a fixed elemental volume thus diffusion is 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. Based on previous studies by Pilou et al. [2011;2013] who developed a validated, computationally efficient fully Eulerian (fluid and particles) steady state model that incorporated inertial and external forces effects in the PBE, the present work further develops the model in order to provide a better understanding of the particle transport and deposition mechanisms under unsteady flow fields.

To our knowledge, the proposed method is the first that enables absolute shape conforming structured grid generation of a patient-specific complex geometrical shape starting from medical imaging data. Additionally this is the first time that the transport and deposition of heavy, inert particles are predicted under unsteady flows using an Eulerian formalism of the particles transport equation. As shown in a number of practical applications that we have undertaken, the proposed grid generation method generates high quality computational domains, applicable to complex geometries of human organs, which combined with CFD and CFPD models, can provide an accurate, patient specific framework, for medical diagnosis and prognosis. Furthermore the combination of the efficient grid generation method with the particle transport and deposition Eulerian model can contribute to

the interpretation of particle transport and deposition under highly unsteady flows in the respiratory system, offering better physical insight and serving as a tool for the design and optimization of biomedical applications. In conclusion the development and combination of an efficient grid generation method with an Eulerian CFPD approach provides a powerful model for patient specific bio-fluid simulations and is the main novelty of this thesis.

The structure of the thesis is the following:

- In Chapter 2 the theoretical background regarding grid generation for complex geometries is given. Specifically the structured grid generation techniques and the proposed structured grid generation method are presented. Furthermore the theoretical background regarding particle transport and deposition is given along the presentation of the proposed Eulerian approach.
- In Chapter 3 the application of the grid generation over complex geometries method in two highly interesting biomedical cases (the Abdominal Aortic Aneurysm and the Iliac bifurcation) is presented. Additionally the application of the grid generation method and the particle transport and deposition Eulerian method utilized on the case of high frequency oscillatory flows, adopted by High Frequency Oscillatory ventilator machines, is presented. It has to be noted that the numerical simulation of particle transport and deposition in the HFOV case has never been studied before and is a demanding task in terms of flow field analysis due to the rapid flow reversions and the additional phenomena that are present on highly oscillating flows.
- Finally in Chapter 4, the main findings of the thesis are summarized and future applications and improvements of the presented methods are provided.

Theory

2

2.1 Grid generation for complex geometries

The spatial discretization of the solution domain is essential in order to apply numerical techniques for finding approximate solutions to partial differential equations (PDE). The spatial discretized computational domain is often referred as grid and a grid that conforms to the boundaries of the computational domain as a boundary fitted grid. The boundary fitted grid generation methods are mainly divided in two categories, structured and unstructured while the mixing of those two methods produced a third category referred as hybrid grid generation method.

The most common types of elements utilized in grid generation are triangles or quadrilaterals in two dimensions and tetrahedral or hexahedral elements in three dimensions. The generation of tetrahedral corresponds to unstructured mesh generation as contrasted from structured meshes which are typically comprised of hexahedra.

The use of unstructured computational grids is often preferred as they enable effortless grid generation in complex geometries combined with strong preservation of the geometrical shape. However, unstructured grids are generally considered to provide less accurate solutions than structured grids due to a number of factors, including poor alignment with the primary flow direction and increased numerical diffusion [Longest P. W. and Vinchurkar S.2007]. Overall series of studies showed that structured grid domains used for flow simulation in complex geometries are better than their unstructured counterparts because:

- The use of structured grids decreases the level of numerical diffusion,
- Structured grids have one order of magnitude less grid convergence index (GCI), so mesh independence of flow solution is achieved with fewer elements. It is noted that tetrahedral meshes typically require 4-10 times more elements than a hexahedral mesh to obtain the same level of accuracy [Weingarden V.I. 1994; Cifuentes A.O. and Kalbag. A 1992].
- The use of structured grids reduced run times by a factor of 3 compared with unstructured grids.
- In some types of numerical approximations (i.e., high deformation structural finite element analysis with linear elements), tetrahedral elements will be mathematically ‘stiffer’ due to a reduced number of degrees of freedom associated with a tetrahedral element [Brewer M. et al. 2003]. This problem is also known as ‘tet-locking’.

Similar conclusions are drawn in other studies [Vinchurkar S. and Longest P. W. 2008] which point out the importance of the alignment of the control volume gridlines with the dominant flow direction.

Although the superiority of the structured grid domain is clear, only a few studies use structured grids for the modeling of complex geometries. The main reason is the significant time and effort required for the generation of this grid type.

The objective of the present work is to introduce a new method combining multi-block structured grid generation with precise reconstruction of the complex geometry. The proposed method may be used for the production of structured grids over complex geometries resulting in high quality grids with simple topology.

In this Chapter the theoretical background regarding boundary fitted grid generation is given and the grid generation method proposed is described in detail.

2.1.1 Grid generation theory

In this subchapter, the basic methods for unstructured and structured grid generation are described. Furthermore some grid quality assessment methods are presented.

Grid generations methods - Structured grid

A structured grid is characterized by regular element connectivity that can be expressed as an array. This restricts the element choices to quadrilaterals in 2D or hexahedra in 3D. The nodes of these grids follow a repeating pattern where each internal node is always connected to a specific number of adjacent nodes, as shown in Figure 2.1.

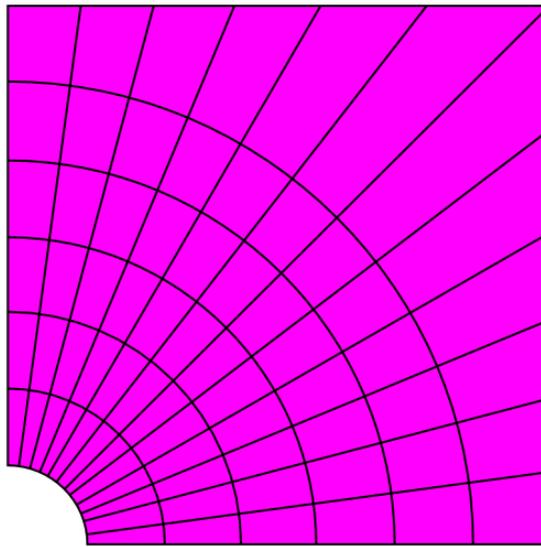


Figure 2.1: A typical structured grid

The presence of this motif suggests that neighboring nodes can easily be identified by some appropriate numbering of nodes which follow a specific pattern. The major properties that one wants to achieve at a structured grid generation procedure are orthogonality of the grid lines and grid clustering near areas of interest, according to the physical problem. A variety of numerical methods are applied for the generation and enhancement of boundary fitted structured grids over two-dimensional or three-dimensional domains (often referred to as curvilinear structured grids), however most of the methods may be classified into the following three categories:

A) Algebraic Methods

The grid generation based on algebraic methods uses a form of interpolation starting from predefined boundary points and generating the internal points. A great advantage of the method is the speed and convenience that the computational domain is generated. Often algebraic methods are used to generate an initial grid that is afterwards enhanced by grid enhancement techniques based on the solution of PDEs.

Algebraic grid generation techniques are transformations from a predefined computational domain to an arbitrary shaped physical domain. This procedure may be expressed as a general equation by Eq.(2.1)

$$T(\xi, \eta, \zeta) = \begin{bmatrix} x(\xi, \eta, \zeta) \\ y(\xi, \eta, \zeta) \\ z(\xi, \eta, \zeta) \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

where x, y, z are the continuous coordinates in the physical domain and ξ, η, ζ are the continuous coordinates in the computational domain with $0 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$. The relationship between the discrete indices i, j, k and the continuous computational coordinates ξ, η, ζ uniformly discretize the computational domain and imply a relationship between discrete neighboring points. The use of the discrete vector valued function $T(\xi_i, \eta_j, \zeta_k)$ for

$$0 \leq \xi_i = \frac{i-1}{i_{\max}-1} \leq 1, \text{ where } i = 1, 2, 3 \dots i_{\max}$$

$$0 \leq \eta_j = \frac{j-1}{j_{\max}-1} \leq 1, \text{ where } j = 1, 2, 3 \dots j_{\max}$$

$$0 \leq \zeta_k = \frac{k-1}{k_{\max}-1} \leq 1, \text{ where } k = 1, 2, 3 \dots k_{\max}$$

produces the actual grid points on the physical domain (referred as “the grid”) and conserves the neighboring invariant.

The most known and important algebraic grid generation method is Transfinite Interpolation (TFI)[Gordon W. N. and Hall C.A 1973]. The advantages of TFI method is that it can generate grids conforming to specific boundaries, grid spacing may be controllable and is computationally efficient and easily programmed.

B) Grid generation methods based on the solution of PDEs

The grid generation based on the solution of PDE is the most common method for structured grid generation and enhancement today. The differential equations are usually Laplace or Poisson type therefore the main concept is that a curvilinear grid could be generated by solving the system of Eq.(2.2)

$$\begin{cases} \nabla^2 \xi = P \\ \nabla^2 \eta = Q \\ \nabla^2 \zeta = R \end{cases} \quad (2.2)$$

where P, Q, R are control functions that affect major properties of the grid. The criteria for the selection of the type of the differential equation governing the grid generation procedure are determined by the requirements of the physical problem. Generally, the major properties concern the smoothness, the orthogonally (as long as it is allowable by the shape of the domain) and the clustering of the grid lines. The control functions P, Q, R may be explicitly specified by the user or calculated based on different assumptions leading to slightly different formulations and different grid properties. A variety of grid generation and enhancement methods based on the

solution of PDEs is available at the literature [Thompson et al. 1985; 1999; Hansen et al. 2005; Kaul U.K. 2010].

C) Conformal mapping grid generation methods

The grid generation based on conformal mapping is mainly used for the surface structured grid generation over complex shape geometries. The main concept is the calculation of a transformation that maps the physical surface domain to a predefined computational domain with desired properties. By the use of this transformation the grid is then created over the physical domain and adapts the properties of the predefined computational domain (orthogonality, grid clustering etc.).

The presented method combines basic algorithms classified in the two first grid generation categories and proposes a new approach for the application of a conformal mapping grid generation method over triangulated surfaces.

Grid generations methods - Unstructured grid

In contrast with the structured grids, unstructured grids do not follow a predefined pattern and the number of neighboring nodes changes from node to node. An example of a 2D unstructured grid is illustrated in Figure 2.2.

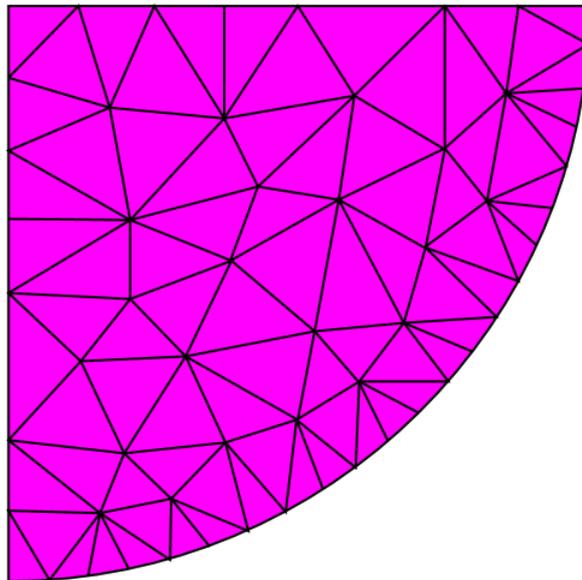


Figure 2.2: A typical unstructured grid

The data required to represent unstructured grids become more complicated, thus for any particular node, the connection with other nodes must be defined explicitly by a connectivity matrix. The presence of the connectivity matrix affects the performance of numerical algorithms for the solving partial differential equations leading to an increased computational cost in the case of unstructured meshes.

The grid generation processes for the unstructured grid are frequently based upon geometrical ideas. There are many methods available, the most widespread are the Delaunay Triangulation [Baker T.J. 1989] and the

Advancing front Method [Peraire J. et al. 1987]. Furthermore techniques combining both the aforementioned methods are developed. Additional information may be found in the literature [Thompson et al. 1999].

Quality assessment methods

Mesh quality can have a large influence upon the accuracy (and efficiency) of a simulations based on the solution of partial differential equations (PDE)'s. Apart from the grid generation method plenty of factors influence mesh quality, including details of the solution to the particular simulation and geometric mesh properties having to do with spacing, curvature, angles, smoothness, etc.

A formal definition of mesh quality is found in the literature by Knupp P.M. [2007] expressed as “*Mesh Quality concerns the characteristics of a mesh that permit a particular numerical PDE simulation to be efficiently performed, with fidelity to the underlying physics, and with the accuracy required for the problem.*” The definition is characterized as excessively theoretical so measurable quantities (mesh quality metrics) had to be chosen in order to asses the mesh quality and compare different types of meshes.

Skewness is one of the primary quality metrics for a mesh and determines how close to ideal (i.e., equilateral or equiangular) a grid element is. Table 2.1 lists the range of skewness values and provides a general guide to the relationship between element skewness and grid element quality based on empirical classification.

Skewness	Element Quality
1	Degenerate
0.9 — <1	Bad
0.75 — 0.9	Poor
0.5 — 0.75	Fair
0.25 — 0.5	Good
>0 — 0.25	Excellent
0	Equilateral

Table 2.1: List of skewness values and an empirical classification of element quality.

According to the definition of skewness, a value of 0 indicates an equilateral element (best) and a value of 1 indicates a completely degenerate element (worst). Degenerate elements are characterized by nodes that are nearly coplanar (collinear in 2D). A basic method for measuring skewness is the deviation from a normalized equilateral angle which applies to all cell and face shapes, e.g., pyramids and prisms. The Equilateral-Volume-Based skewness metric is defined as the result of the Eq. (2.3) calculated for every element,

$$SKM = \max\left[\frac{\theta_{\max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{\min}}{\theta_e}\right] \quad (2.3)$$

where θ_{\max} is largest angle in the face or cell, θ_{\min} is the smallest angle in the face or cell and θ_e is the angle for an equiangular face/cell (e.g., 60 for a triangle, 90 for a square). The 0.0 value corresponds to a perfect equiangular element while value 1.0 corresponds to an absolute skew element.

2.1.2 Structured grid generation from triangulated surfaces obtained by medical imaging data

The generation of a structured grid over triangulated surfaces obtained by medical imaging data is considered an important task among the bio-fluid computational science community. Due to the requirement of the detailed geometry representation necessary for patient specific models and the fact that the most common output from medical imaging data programs are geometries described by triangulated surfaces.

In order to address the problem a set of approaches has been developed. One of the earlier studies that combined medical imaging data with structured grid generation is the work by Long et al. [1998]. The grid topology that is suggested by this study, referred to as “butterfly topology”, was used in many other studies until today [Antiga et al. 2002; De Santis et al. 2010; Longest, et al. 2007]. The earlier of these studies utilize the computed vessel centerlines, and unite slices of planar grid with the sweep method [Long et al. 1998; Antiga et al. 2002]. The more recent, more elaborated studies, describe the patient specific geometry by template parametric planes [Wolters et al. 2005; De Santis et al. 2010] or with the use of non-uniform rational basis spline (NURBS) functions [Shih A. M. et al. 2005; Bazilevs et al. 2006; 2008; 2009] and deform template meshes in order to conform to the initial geometry description.

The common characteristic in these studies is the high quality grid they produce but with the disadvantage of the imprecise surface representation. Furthermore in a recent study De Santis et al. [2010] conclude that a future trend is the structured grid generation with the use of a more detailed patient specific geometry description such as a surface triangulation (e.g. STL type surface models).

An STL type surface model is the most common geometry representation produced by the reconstruction of human organs from medical imaging visualization and handling software. STL is a file format (native to the stereo-lithography CAD software) which describes a raw unstructured triangulated surface with the unit normal vector and the location of the vertices (ordered by the right-hand rule) of the triangles using a 3D Cartesian coordinate system.

In the past Giannakoglou et al. [1996] suggested a numerical algorithm for handling arbitrary surfaces described through triangles and transformed them into structured surface grids. Additionally Gopalsamy et al. [2005] suggested a method that produced surface structured grids over triangulated surfaces or NURBS through reparametrization. Overall the aforementioned studies produced remarkable results but never concluded to a fully applicable method that may produce a 3D volume structured computational domain starting from triangulated surfaces.

The proposed method [Makris et al. 2012] enables structured grid generation over a complex geometrical shape starting from triangulated surfaces. The purpose of the methodology is to generate an advanced tool that is utilized in the objective of creating patient specific models of the physical shape of a human organ starting from medical imaging data. This procedure comprises of the creation of a structured surface grid over the complex geometry and then the generation and enhancements of the volume grid based on a set of in-house grid generation codes.

The grid generation procedure is comprised of the following steps:

- Separation of the 3D triangulated shape to two shells.
- Generation of the surface structured grid.
- Union of the two separate structured shells to one.

- Creation of a grid clustering area near the wall.
- Creation of the initial inner grid, using a linear transfinite interpolation (TFI) method.
- Refinement of the grid according to the physical problem.

Separation of the 3D triangulated shape to two shells.

The proposed algorithm for structured surface grid generation is applicable only on open manifolds. However the triangulated surface of a complex geometry is usually a closed manifold. Therefore, the triangulated surface has to be split into two open manifolds, forming two shells. The first group forms the right shell and the second group forms the left shell. In order to illustrate this procedure, the separation of a triangulated surface representing a human artery is depicted in Figure 2.3. This procedure may be done by the application of a simple spatial filter, which separates the geometry in two groups of triangles or with the use of a geometry handling software such as Salome, pyFormex etc.

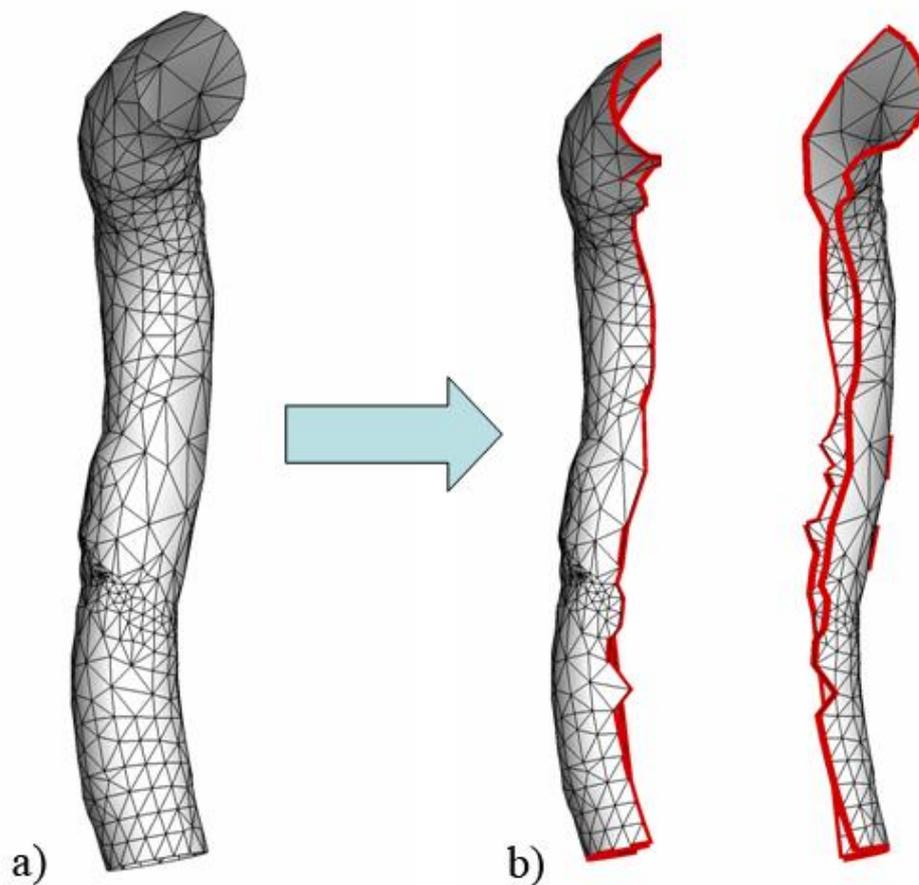


Figure 2.3: a) The triangulated surface representing a part of a human vessel and b) the closed surface separated to two open manifolds

Generation of the surface structured grid.

The surface structured grid generation is done on each shell, separately. The production of a surface structured grid with fine detail and respect to the initial triangulated surface shape is done. The first step in the procedure is the creation of an isomorphic parameterization for surface triangulation following the theory of Floater [1997]. From the application of Floater's algorithm to a surface triangulation in R^3 , a planar triangulation in a predefined two dimensions ($2D$) domain, with a one- to - one correspondence between nodes, edges and faces, is formed. This is done by solving a linear system of equations with physical meaning that corresponds to the conservation of a convex combination factor for every triangle in R^3 adapted to the newly calculated triangles in $2D$. In Figure 2.4, a surface triangulation and an isomorphic planar triangulation produced by the algorithm is shown.

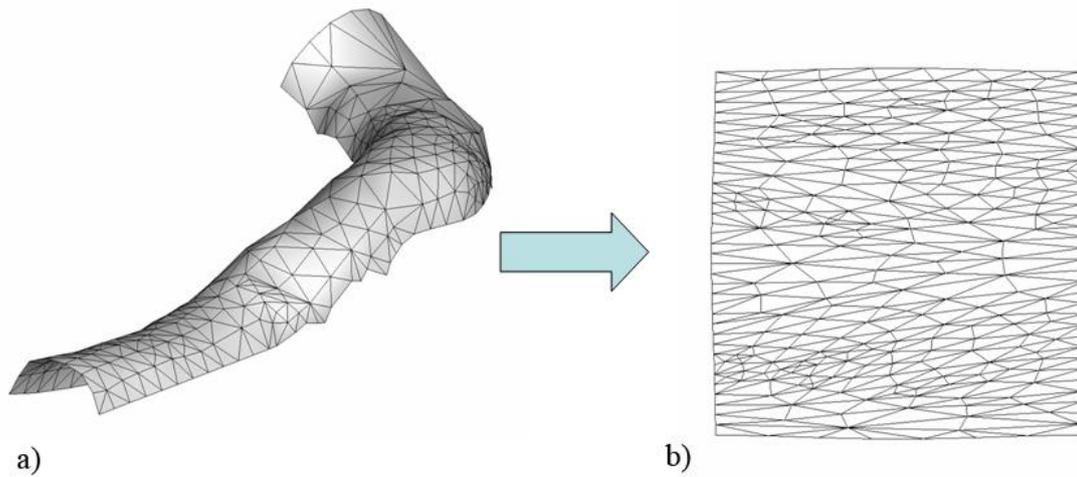


Figure 2.4: a) A surface triangulation and b) an isomorphic planar triangulation produced by the proposed algorithm.

A more detailed description of the isomorphic planar triangulation algorithm follows.

Definitions

A surface triangulation S consists of a set of vertices V , a set of edges E , and a set of triangular faces F satisfying the next properties: Each vertex in V belongs to R^3 , each edge E is a line joining 2 vertices, each triangle is formed by 3 edges. Each vertex will be part of at least one edge, and each edge will be part of at least one triangle. Intersection of two triangles will be either empty, or an edge, or a vertex.

A convex combination is a linear combination of points where all coefficients are non - negative and sum up to one. Formally, given a finite number of points $\{x_i\}$ with $i = 1, n$ in a R^3 space, a convex combination of these points is a quantity of the form $a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + \dots + a_nx_n$ where a_i belong to the space of real numbers \mathbb{R} and satisfies $a_i \geq 0$ and $a_1 + a_2 + a_3 + \dots + a_n = 1$

Algorithm

The development of the algorithm consists of the following steps:

If $V = \{P_i\}$ is the set of vertices on S where $\{P_i\}$ belongs to R^3 , $i = 1, N$ and N is the number of vertices, then

- Identify the boundary vertices and label them $\{P_i\}$ with $i = 1, n$ for the internal vertices and $i = n + 1, N$ for the boundary vertices.
- Place the boundary vertices on the bounds of a convex $2D$ domain. As an initial example a simple square $[0,1]$ is used for the utilization of the methodology, however a more sophisticated approach, described in detail in the manuscript, is proposed for this step.
- Calculate the convex combination factor λ for every triangle of the S triangulation.
A convex combination is a linear combination of points where all coefficients are non-negative and sum up to 1. More detail about the calculation of the convex combination factor can be found in Floater's [1997] work.
- Form the system of linear equations

$$Q_i = \sum_{j=1}^N \lambda_{i,j} Q_j$$

where $i = 1, n$. The physical meaning of the system consists of the conservation of the convex combination factor of every triangle in $3D$ as well as in $2D$.

- Solve this system to obtain Q_i which are the coordinates of the vertices inside the parametric $2D$ domain. So, the isomorphic planar triangulation is produced.

It is important to notice that the use of different convex combination factors λ will produce different planar triangulations. In Figure 2.5 two different planar triangulations obtained by the use of two different convex combination factors are depicted. On the left of Figure 2.5 the uniform parametrization with λ equal to

$$\lambda_{i,j} = \frac{1}{V_i}$$

is used while on the right of the Figure 2.5 the weighted parametrization with λ equal to

$$\lambda_{i,j} = \frac{d_{ij}}{\sum_{j=1}^N d_{ij}}$$

is used, where d_{ij} is the distance between neighbouring triangle vertices.

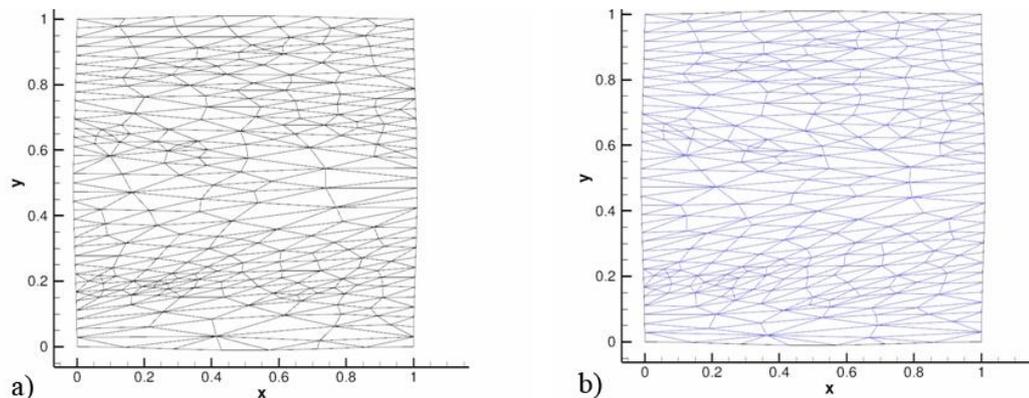


Figure 2.5: a) The planar triangulation produced by the use of the uniform parametrization, b) The planar triangulation produced by the use of the weighted parametrization.

In order to make the differences more presentable in Figure 2.6 a detail of the overlapping of the two different planar parameterizations is illustrated.

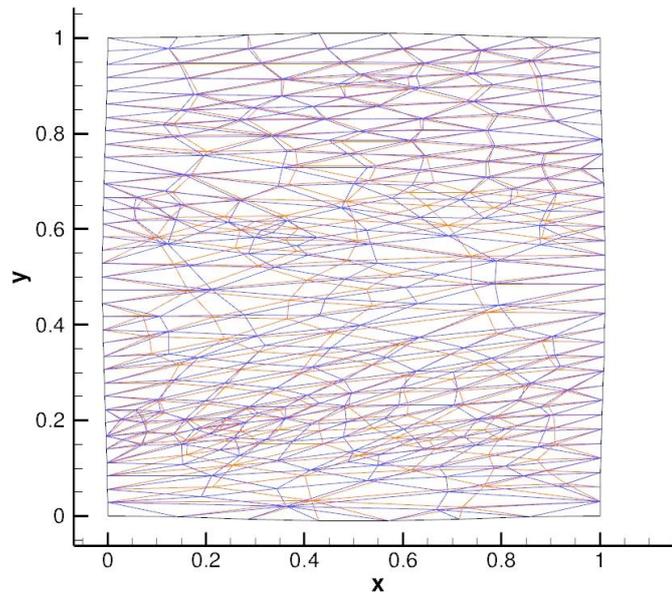


Figure 2.6: A detail of two overlapping planar triangulations. The Blue colored is the triangulation formed by the uniform parametrization while the Red colored is the triangulation formed by the weighted parametrization.

The difference in the planar triangulation will lead to a different surface structured grid. Therefore the selection of the convex combination factor λ is a component that will affect the whole grid generation procedure.

The second step of the procedure is the use of the isomorphic mapping to produce a structured surface grid. Therefore the next formalism is developed:

- A structured grid is interpolated in the planar triangulation. In Figure 2.7 an overlap of the planar structured grid and the planar triangulation used in the interpolation process is shown.

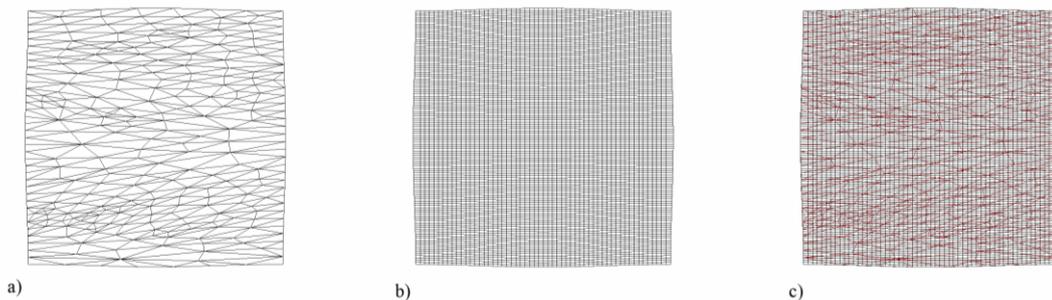


Figure 2.7: a) The planar triangulation b) The planar structured grid c) The overlapping of the structured grid over the planar triangulation

- The evaluation of which point of the structured grid belongs to which triangle of the planar triangulation is done based on the work of Moller [1998].
- The barycentric coordinates for every structured grid vertex placed inside a triangle are calculated based on Floater et al. [2005] work.
- The $2D$ structured grid is transformed to the $3D$ structured surface grid, by the use of the invariant barycentric coordinates calculated on the planar triangulation.

A more detailed description on some aspects of the formulation follows.

For the evaluation of which point of the structured grid belongs to each triangle of the planar triangulation the calculation of the barycentric coordinates been done and a simple test has to applied. For the calculation of the barycentric coordinates Eq.s (2.4 - 2.5) are used.

$$u = \frac{\vec{AB} \cdot \vec{AB} * \vec{AP} \cdot \vec{AC} - \vec{AC} \cdot \vec{AB} * \vec{AP} \cdot \vec{AB}}{\vec{AC} \cdot \vec{AC} * \vec{AB} \cdot \vec{AB} - \vec{AC} \cdot \vec{AB} * \vec{AC} \cdot \vec{AB}} \quad (2.4-2.5)$$

$$v = \frac{\vec{AC} \cdot \vec{AC} * \vec{AP} \cdot \vec{AB} - \vec{AC} \cdot \vec{AB} * \vec{AP} \cdot \vec{AC}}{\vec{AC} \cdot \vec{AC} * \vec{AB} \cdot \vec{AB} - \vec{AC} \cdot \vec{AB} * \vec{AC} \cdot \vec{AB}}$$

Where u and v are the two barycentric coordinates, A , B and C are the triangle vertices while P is the structured grid node. For the determination of the triangle that each structured grid vertex P fits, a simple rule described by Eq.s 2.6 is followed. The two barycentric coordinates u and v have to be positive and their sum should be less or equal to 1, those conditions are described by Eq.(2.6).

$$\left\{ \begin{array}{l} u \geq 0 \\ v \geq 0 \\ u + v \leq 1 \end{array} \right\} \quad (2.6)$$

In Figure 2.8 an example case for the calculation of the barycentric coordinates and the application of the simple rule defining a point inside a triangle is illustrated.

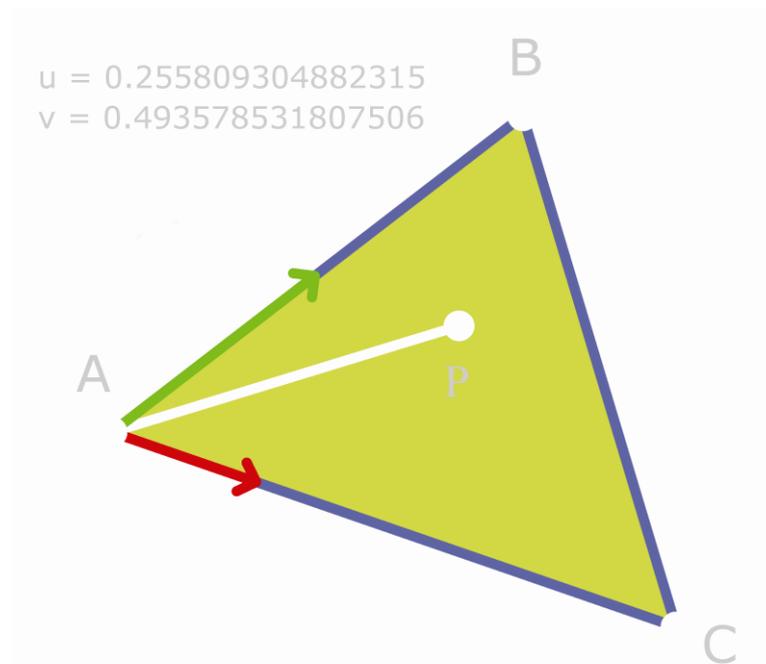


Figure 2.8: An example case for the calculation of the barycentric coordinates for a vertex P inside a triangle

Due to the isomorphic transformation, the calculated barycentric coordinates are invariant under the planar and the surface triangulation. Using that information, along with a simple transformation, a surface structured grid over the surface triangulated shape is obtained. In Figure 2.9 the surface structured grid obtained by the methodology and the initial surface triangulation is shown.

The number of elements of the surface grid is equal to the number of elements of the planar structured grid that was projected on the planar triangulation. As a result the number of elements of the final grid can be controlled through the control of the projected planar grid.

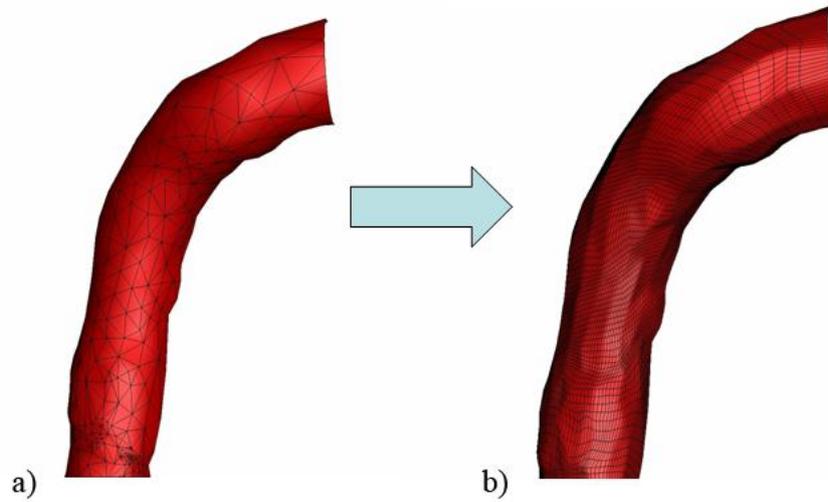


Figure 2.9: a) The initial triangulated surface b) The initial surface structured grid produced

Union of the two separate structured shells to one.

After the surface structured grid is generated over the two shells, the two shells are united and a new surface structured grid is formed. In Figure 2.10 the union of the two shells is depicted. The united surface structured grid will be used for the generation of the inner domain.

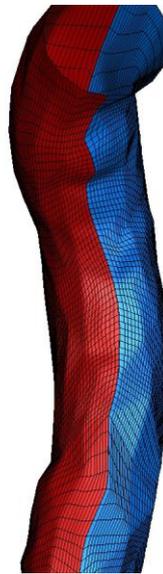


Figure 2.10: The one to one union of the two separately generated surface grids

Creation of a grid clustering area near the wall.

For the creation of the inner domain the normal vector of every point on the surface is calculated by the Eq. (2.7)

$$\vec{N} = \frac{\vec{g}_1 \times \vec{g}_2}{|\vec{g}_1 \times \vec{g}_2|} \quad (2.7)$$

Where \vec{g}_1 is the first and \vec{g}_2 is the second covariant metric of the curvilinear coordinate system that conforms to the surface grid that was generated. By writing the curvilinear covariant metrics in terms of the Cartesian coordinate system, Eq. (2.7) can be expressed as in Eq.(2.8)

$$N = \frac{\frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta}}{\left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \right|} = \frac{\left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \vec{i} - \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \vec{j} + \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \vec{k}}{\left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \right|} \quad (2.8)$$

Where \vec{r} is the position vector, and ξ and η are the continuous curvilinear coordinates, often referred in discrete form as i and j .

Based on the Normal vector values calculated, the surface grid points are extruded towards the inner of the vessel shape. The distance of the extrude operation is selected along with the number of hexahedral elements created. By controlling those two parameters, multi-block grids that cluster near the wall are produced. Precautions are taken to avoid grid overlapping. Grid overlapping is possible to appear if the extrude distance is large compared with the vessel diameter or surface parts with extremely high curvature are present. To avoid this situation, extrude distances comparable with the arteries wall thickness based on Kleinstreuer et al. [2006] are selected.

Creation of the initial inner grid, using a linear transfinite interpolation (TFI) method.

The next step is the creation of an initial 3D volume grid using the linear transfinite interpolation (TFI) method [Gordon W. N. and Hall C.A.1973]. The result of this procedure is a multi-block structured grid with the ability to fully control the grid clustering near the vessel walls by specifying the number of elements and the length of the cluster layer. In Figure 2.11 two different inner grids produced by the same surface grid are depicted.

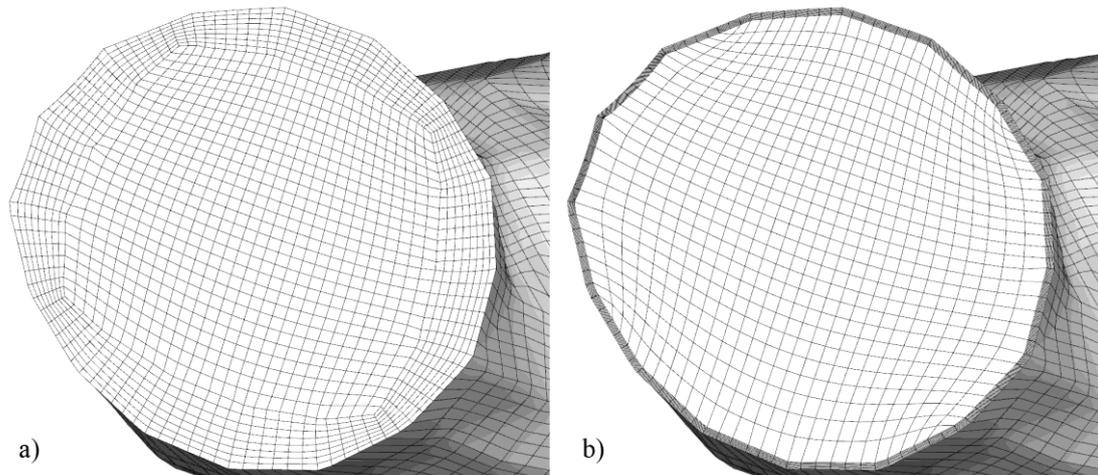


Figure 2.11: a) The inner grid produced with large clustering distance b) The inner grid produced with small clustering distance

Refinement of the grid according to the physical problem.

The grid refinement, according to the physical problem computational needs and with respect to the surface shape is following. The refinement is done by an in-house code for 3D grid enhancement based on the solution of elliptic partial differential equations, developed according to Thompson et al. [1999]. In Figure 2.12 a slice of the inner grid is depicted before and after the refinement -enhancement procedure.

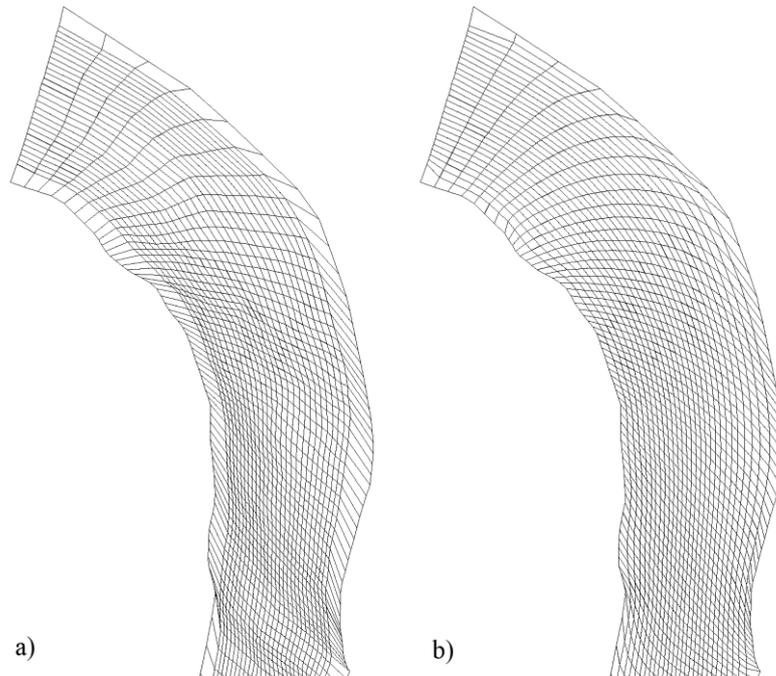


Figure 2.12: a) A slice from the initial inner grid b) A slice from the inner grid after the enhancement procedure

A result of our methodology is the multi-block structured computational grid depicted in Figure 2.13. The grid conforms to the triangulated surface of the vessel and with the application of a 3D grid enhancement code together with the multi-block technique a local clustering of elements was applied near the walls.

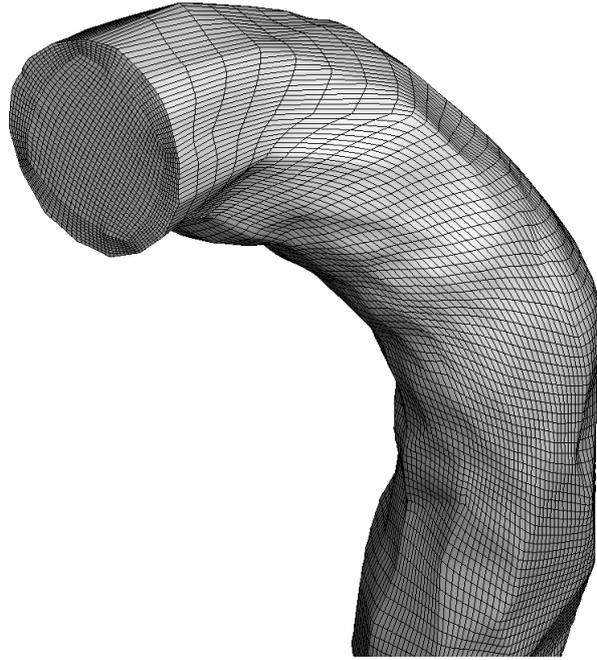


Figure 2.13: The structured grid of a patient specific human vessel produced by the methodology

2.1.3 Comparisons of different grid generation methods

In order to evaluate the developed method against other meshing methods, a visual and quantitative comparison of results calculated by different grid types is done.

For the comparisons three different grid types (hexahedral structured, pure unstructured tetrahedral and hybrid prismatic unstructured) were used. The initial geometry was a human vessel reconstructed by the use of medical imaging handling and visualization software based on data coming from a CT examination. For the unstructured and hybrid grid generation commercial unstructured grid generation software (Ansys ICEM CFD®) was used. Three gradually finer unstructured grids were generated using the advancing front method and consisted of 249.795, 705.895 and 1.859.036 tetrahedral elements. In Figure 2.14 the three unstructured grids are visualized.

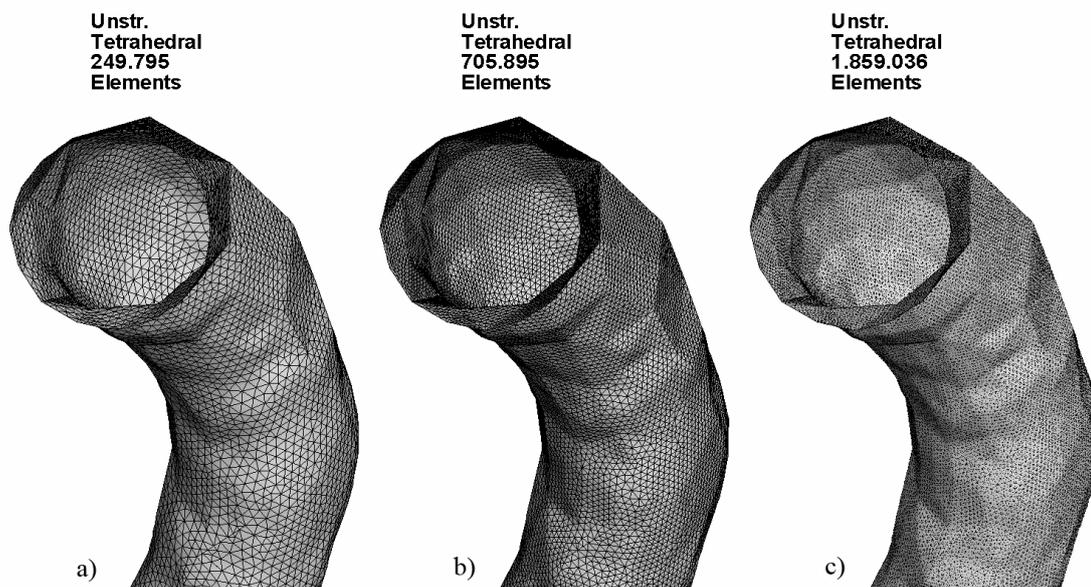


Figure 2.14: Three gradually finer unstructured grids consisting of a) 249.795, b) 705.895 and c) 1.859.036 tetrahedral elements.

Three gradually finer hybrid unstructured grids were generated using a prismatic layer development method and the advancing front method for the internal part and consisted of 242.284, 607.023 and 1.598.526 elements. In Figure 2.15 the three hybrid grids are visualized.

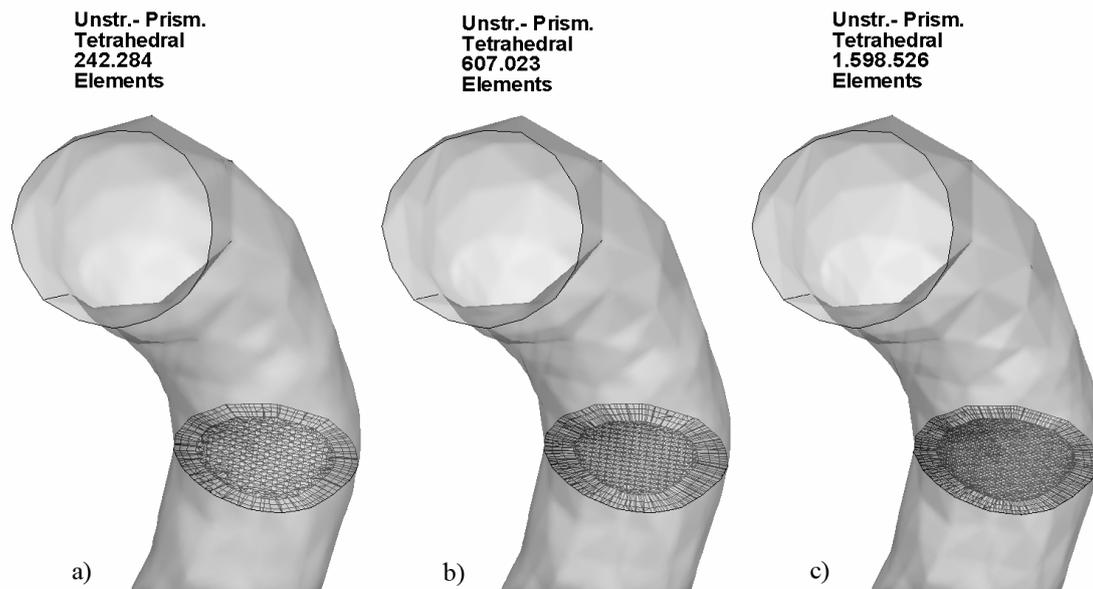


Figure 2.15: Three gradually finer hybrid unstructured grids consisting of a) 242.284, b) 607.023 c) 1.598.526 elements

On the other hand, a multi-block structured grid generated by the presented method, consisted of 194.880 hexahedral elements, was selected as an adequate grid resolution for this comparison. The structured grid is depicted in Figure 2.13. Summary data about the computational domains, which are used for the comparison, are presented in Table 2.2.

Grid Name	Grid type	Type of Grid Elements	Number of Elements
UnstrCoarse	Unstructured	Tetrahedral	249.795
UnstrMid	Unstructured	Tetrahedral	705.895
UnstrFine	Unstructured	Tetrahedral	1.859.036
PrismCoarse	Hybrid	Hexahedral -Tetrahedral	242.284
PrismCoarse	Hybrid	Hexahedral -Tetrahedral	607.023
PrismCoarse	Hybrid	Hexahedral -Tetrahedral	1.598.526
Structured	Structured	Hexahedral	194.880

Table 2.2: Summary data about the compared computational domains.

The selected simulation for the comparison was representing a typical case of blood flow in the aorta. [Kleinstreuer et al. 2006]. The flow field was calculated by the Ansys CFX® software and blood was simulated as an incompressible, homogenous and Newtonian fluid. The blood density was assumed equal to 1056 kg/m^3 and the dynamic viscosity equal to $3,1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$. As boundary conditions, a constant velocity profile was selected giving a Reynolds number equal to 1200, while the outlet pressure was selected equal to 112 mmHg. The walls were considered smooth and the no slip condition was applied. The performed CFD simulation, for all the domains, predicted a pressure and velocity distribution in the physiological range and corresponded to the expected values reported in previous studies [Kleinstreuer et al. 2006].

For a quantitative comparison of the differences of the calculated flow fields the velocity magnitude of 90 geometrical points inside the computational domain was used. The geometrical points were selected to be close to the centerline of the vessel. In order to quantify the difference of the flow fields developed inside different computational domains, a relative error measurement is done. For that purpose Eq.(2.9) calculates the formula of the relative error variable \mathcal{E}_i at selected geometrical points and Eq.(2.10) calculates the root mean square value \mathcal{E}_{rms} of the same variable [Longest W. P. and Vinchurkar S. 2007].

$$\mathcal{E}_i = \left| \frac{u_{i,coarse} - u_{i,fine}}{u_{i,fine}} \right| \quad (2.9)$$

$$\mathcal{E}_{rms} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{90} \mathcal{E}_i^2}{90}} \quad (2.10)$$

Both Eq.s (2.9) and (2.10) are taking in account the values of the same 90 geometrical points in all the computational domains. The velocity magnitude results at those 90 geometrical points for the three unstructured grids are depicted in Fig 2.16.

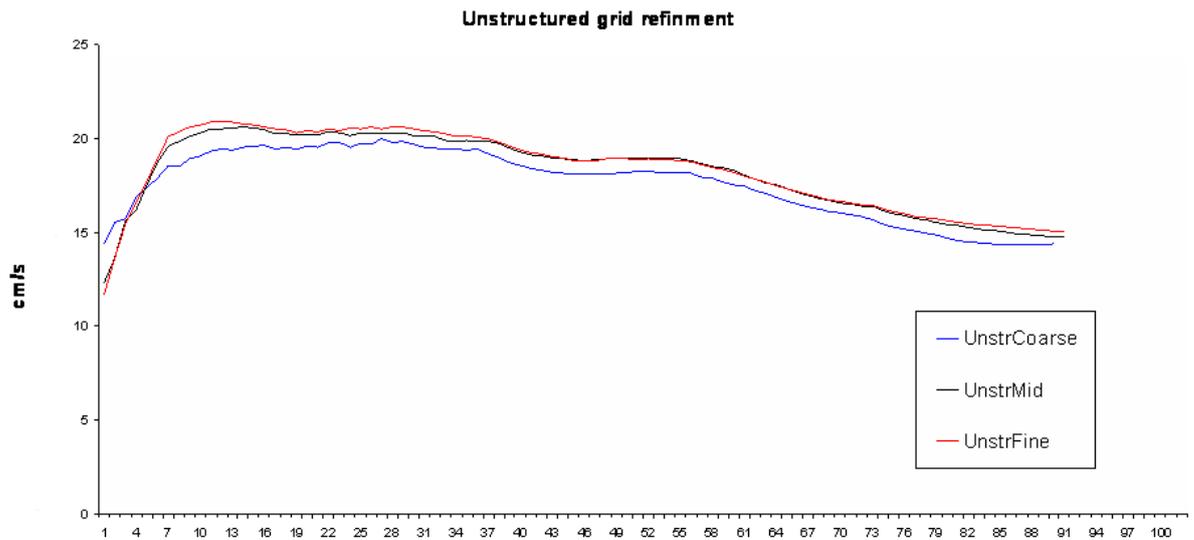


Figure 2.16: Velocity magnitude of 90 geometrical points inside the computational domain calculated by three unstructured grids

As it is visible by the graph in Figure 2.16 the “coarse” unstructured grid (described as UnstrCoarse in Figure 2.16) calculated lower velocity magnitude at almost every point of the line. The “coarse” unstructured grid consisting of 249.795 elements (described as UnstrCoarse in Figure 2.16), underestimated the velocity magnitude with a relative error root mean square of 5.5% compared with the fine Unstructured grid (described as UnstrFine in Figure 2.16) and produced a solution with rough velocity transition over neighboring geometrical points. A refinement by a factor of 2.4 was needed and an unstructured grid with more than double elements (consisting of 705.895 grid elements described as UnstrMid in Figure 2.16) than the coarse unstructured grid was used in order to improve the results and produced \mathcal{E}_{rms} equal to 1.2% compared with the fine Unstructured grid and less visual sings of numerical skewness. For a further improvement of the solution, a

grid consisting of 1.859.036 elements was used and considered to be the more accurate grid between the three unstructured grids used in this comparison (described as UnstrFine in Figure 2.16).

The same procedure was done for the three gradually finer hybrid grids and the velocity magnitude of the same 90 geometrical points inside the computational domain is depicted in Fig 2.17.

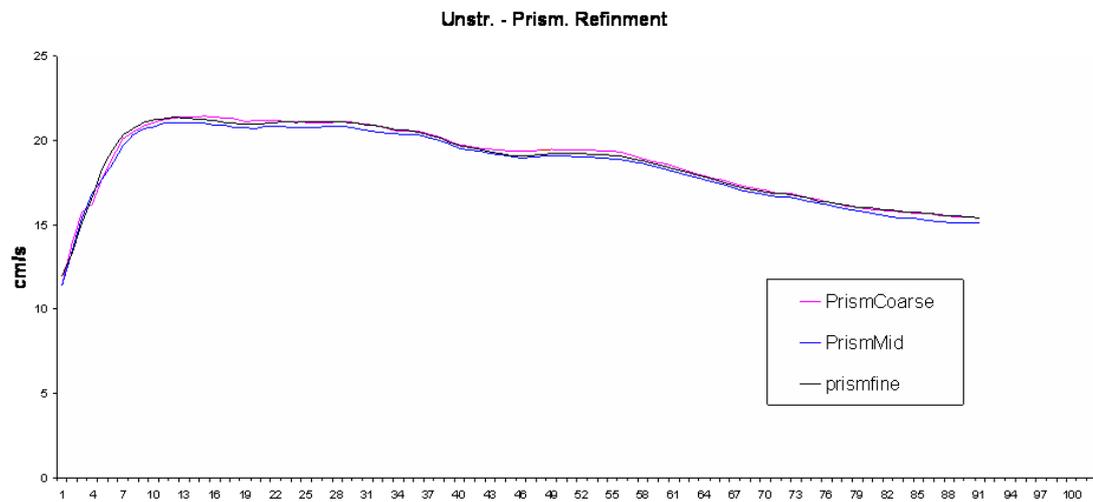


Figure 2.17: Velocity magnitude of 90 geometrical points inside the computational domain calculated by three hybrid prismatic grids

Aiming to the minimization of the relative error root mean square \mathcal{E}_{rms} and the appearance of less rough velocity transition over neighbouring geometrical points three gradually finer hybrid grids were taken into account. The \mathcal{E}_{rms} was calculated to be equal to 1.9% between the PrismCoarse and the PrismFine hybrid grid and 1.6% between the PrismMid and the PrismFine grid. In order to achieve the best results in terms of grid efficiency the fine hybrid grid consisting of 1.859.036 elements was used and considered to be the more accurate grid between the three hybrid grids used in this comparison (described as PrismFine in Figure 2.17).

A visual comparison of the contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for the three unstructured and the three hybrid grids is illustrated in Figure 2.18. A visual comparison of the contour's colours reveals the underestimation of the velocity magnitude by the unstructured grids, a phenomenon that is more intended in the "coarse" unstructured grid, due to the poor alignment between the primary velocity vector and the tetrahedral elements of the grid [Vinchurkar S. and Longest W. P. 2008]. Furthermore, the unstructured grid shows evidence of high numerical skewness with the occurrences of curly contour boundaries. The effect is allayed and almost invisible as the grids were refined, although the hybrid grids provides a more smooth velocity magnitude contour with the use of less elements than the unstructured grids.

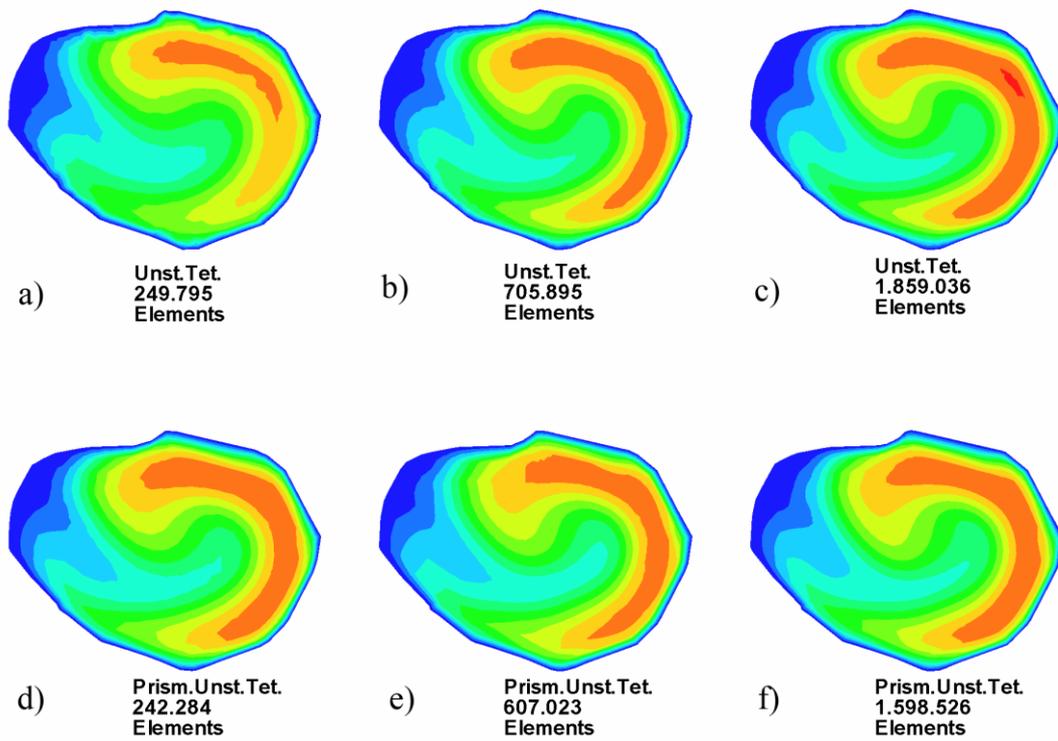


Figure 2.18: Contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for a),b),c) the three unstructured and d),e),f) the three hybrid grids.

In order to evaluate the quality of the structured grid developed by the proposed method against other meshing methods a comparison of the results of the same simulation between a structured grid consisting of 194,880 elements and the finer grids of the other two meshing methods was carried out. A visual comparison of the contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for the three grids is illustrated in Figure 2.19.

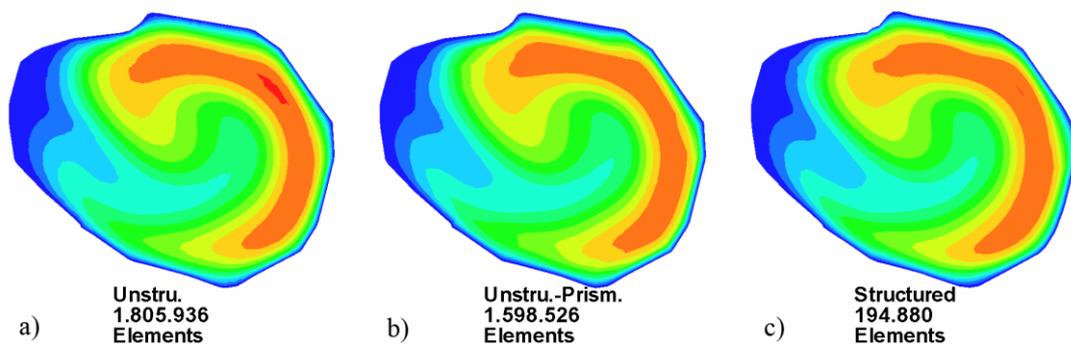


Figure 2.19: Contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for three grids of different type a) Unstructured, b) Hybrid prismatic unstructured and c) Structured.

A comparison based on the velocity magnitude of 90 geometrical points inside the computational domain calculated by the three different grid types is illustrated in Figure 2.20. The comparison reveals that the

structured grid provided smoother flow fields with less rough velocity magnitude transitions between neighbouring points.

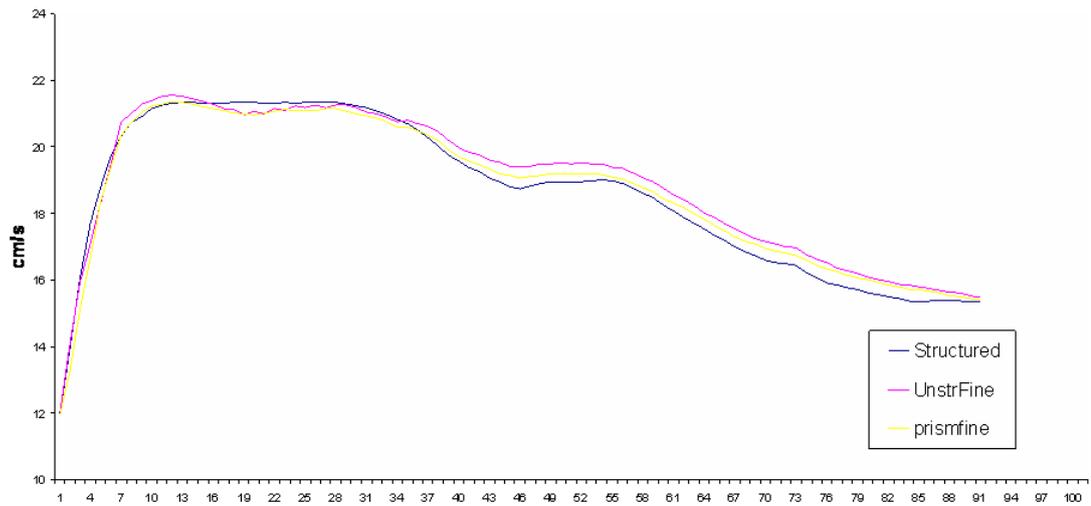


Figure 2.20: Velocity magnitude of 90 geometrical points inside the computational domain calculated by three different type grids

More detailed illustrations show clearly that numerical skewness expressed as curly contour boundaries is less evident in the structured grid taking into account that the other grids use 8 or 9 times more elements. The illustrations of some details are depicted in Figure's 2.21; 2.22; 2.23.

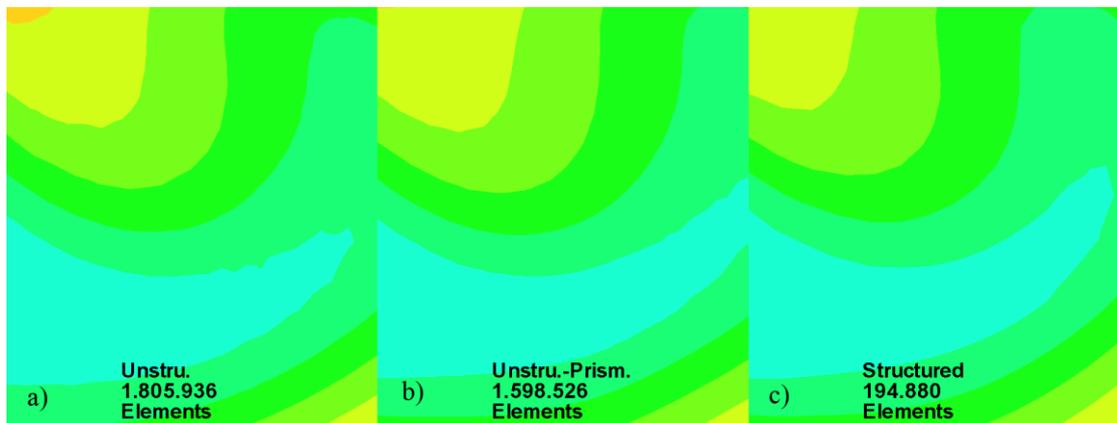


Figure 2.21: Detail of the contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for three grids of different type a) Unstructured, b) Hybrid prismatic unstructured and c) Structured.

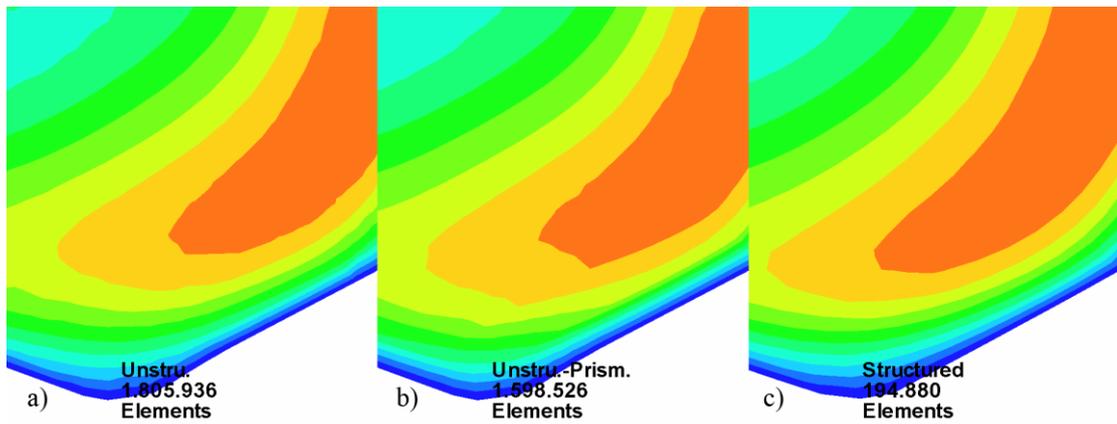


Figure 2.22: Detail of the contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for three grids of different type a) Unstructured, b) Hybrid prismatic unstructured and c) Structured.

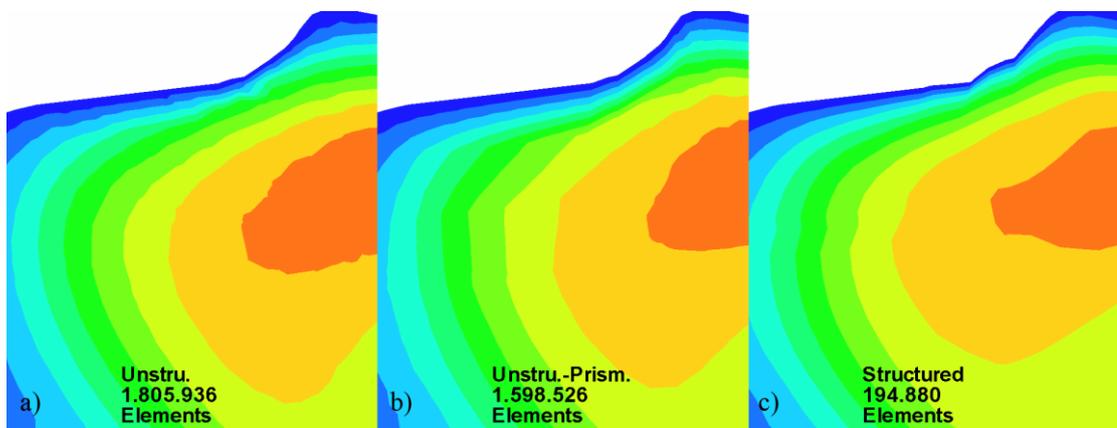


Figure 2.23: Detail of the contour of the velocity magnitude at an axial planar section of the vessel for three grids of different type a) Unstructured, b) Hybrid prismatic unstructured and c) Structured.

Based on the visual comparisons we may suggest that the use of the structured grid provided more smooth flow fields. The unstructured grid shows evidence of high numerical skewness with the occurrences of curly lines and rough velocity transition over neighboring geometrical points. Those facts suggest the structured grid to be more accurate in the simulation of secondary flows. Furthermore, the result of the underestimation of the secondary velocities by the use of the unstructured domain, may lead to a calculation of lower vertical pressure on the wall and a shear strain rate underestimation.

The observed differences and the visualization of the flow fields obtained by the different computational grids is in agreement with conclusions reported by previous comparison studies [Vinchurkar S. and Longest W. P. 2008], considering the structured grid capable to provide more accurate flow field solutions at similar grid resolution.

2.1.4 Conclusions

In Chapter 2.1 a brief theoretical background regarding grid generation is described and the newly proposed structured grid generation method for the grid generation over triangulated surfaces obtained by medical imaging data is presented. Initially the conclusion of different comparison studies between structured and unstructured grid available in the literature are summarized. Those comparisons underlined the evident superiority of the structured grid over the unstructured grid, even though noted that the use of unstructured grid in bio-fluid simulations is often preferred due to the ability of quick and effortless grid generation in complex geometries combined with strong preservation of the geometrical shape.

Next the major structured grid generation techniques, classified in three categories, are presented along with a very short reference on unstructured grid generation techniques. Additionally a detailed presentation of the proposed grid generation method, along the algorithms and a simple example, is done. Furthermore a visual and quantitative comparison between the grid produced by the proposed method and grids produced by other unstructured grid generation methods is carried out and concluded to similar results reported by other studies.

Overall the proposed method is a considerable step towards patient specific modeling of bio-fluid simulations, due to the detailed geometry representation of human organs and the generation of a high quality grid that permits the solution of PDEs with accuracy, speed and fidelity.

2.2 Particle Transport and Deposition

In this Chapter the theoretical background regarding particle transport and deposition in aerosol flows is given and the numerical models used are presented. Aerosol is a dispersion of small solid or liquid particles suspended in a gas, usually air. An aerosol is a two phase system with a continuous phase and a dispersed phase, called particulate phase, which may be solid or liquid. The governing equations and the solution techniques of the continuous phase are considered trivial therefore are briefly presented, while the incorporation of the Eulerian formulation in the time dependent particle flows is described in detail.

2.2.1 Continuous phase

Governing equations

For the calculation of the fluid flow fields the incompressible time dependent Navier – Stokes equations are solved by the finite-volume method. The flow is assumed to be incompressible, justified due to the low flow velocities in the biological cases that the developed model is applied. Eq. (2.11) gives the mass continuity equation for the incompressible flow while Eq. (2.12) gives the momentum conservation equation for a time dependent case, where τ is the stress tensor, \vec{U} is the velocity and p the pressure of the fluid.

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} \otimes \vec{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \quad (2.12)$$

Numerical solution

The incompressible time dependent Navier – Stokes equations are solved numerically using the commercial software Ansys CFX®. The solver is based on the finite volume methodology which is thoroughly described in many manuscripts [Ferziger J. and Peric M. 2002].The momentum equations (2.12) are solved using a first – order forward Euler scheme for the time dependent term, and the Ansys CFX® high resolution scheme (second order upwind bounded) for the advection term. Ansys CFX® is also capable of working in parallel mode, which significantly reduces the computational time, and thus it allows obtaining time consuming transient flow fields.

Nevertheless, Ansys CFX® exports the solution in an arbitrary node numbering format. Therefore, a methodology to use the flow field from Ansys CFX® with the in-house aerosol transport and deposition code has been developed. The solution files were exported by utilizing the CGNS (CFD General Notation System) protocol. This protocol was developed as an effort to standardize CFD input and output format [Poirier D. et al. 2000], and provides an enormous amount of information about the mesh nodes proximities and numbering. Therefore a code for the “renumbering” of the nodes (based on multiple node neighbouring comparisons) in a format capable to be imported to the in-house aerosol dynamics code has been developed.

2.2.2 Dispersed phase

General Theoretical remarks

Aerosol particle size spans over multiple orders of magnitude; from a few nanometers ($1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$) to several micrometers ($1\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m}$). Based on their diameter, particles are classified into coarse particles ($d_p > 1\mu\text{m}$) and fine particles ($d_p < 1\mu\text{m}$). Furthermore, a classification used frequently is nanoparticles, for which $d_p < 50$ or 100nm .

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 and shape that are the determining factors of the system behavior in the majority of the applications. For the determination of particle size since a particle can be regarded spherical, particle diameter, d_p , is often used as representative size. However, there are many cases where the shape of the particles is irregular. Then an equivalent diameter is usually employed (e.g. aerodynamic diameter and Stokes diameter), which is the diameter that a spherical particle should have in order to present the same behavior based on predefined criteria.

Particle size may affect not only the characteristics of an aerosol, but the physical laws that describe its behavior too. The ratio of the double mean free path λ , of the carrier gas to the particle diameter, d_p , 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 regime, Navier-Stokes equations are used to calculate the drag force on the particle, whereas in the second regime, 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 indicators 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 the proposed aerosol transport and deposition model an Eulerian formulation for the solution of the particle population balance equation (PBE) is used. The Eulerian approach offers significant advantages over the frequently chosen Lagrangian approach [Pilou et al. 2011]. Initially, it may be used for small particle diameters

where the Lagrangian approach becomes highly demanding in terms of numerical implementation. Furthermore the Eulerian model can take into account simultaneous diffusive and inertial particle transport.

In the proposed model the particles are assumed as monodispersed and the calculating of the particle concentration inside a fixed elemental volume is done. Moreover, for most two-phase flows in the respiratory, the particulate phase is dispersed enough, i.e. the total volume of the particles does not exceed 0.0001% of the total volume, therefore one-way coupling of the phases is assumed. Particle velocity in the mass conservation equation of the dispersed phase is obtained by an expression in the limit of the 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 the concentration. The modified equation is solved numerically using the finite volume technique. More details about the incorporated equation and the solution method follow.

Governing equations

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]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\vec{u}_p) = \left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{\text{growth}} + \left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{\text{coag}} \quad (2.13)$$

where c is the dimensionless particle concentration and \vec{u}_p is the dimensionless particle velocity.

In Eq.(2.13), 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 developed model is based on a description of the particles General Dynamic Equation (2.13) with focus on the transport of a population of particles and the assumption of the internal processes (growth, coagulation) absence. Based on that remarks the GDE becomes Eq. (2.14) known as Particle Transport Equation (P.T.E.)

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\vec{u}_p) = 0 \quad (2.14)$$

The proposed method is a time depended extension of a formerly developed method by Pilou et al. [2011] and may obtain the average particle velocity \vec{u}_p under different conditions without solving the average particle momentum equation.

Considering a two-fluid methodology for the aerosol system, where particles are the dispersed phase into a continuous phase (fluid) due to the dispersed phase dilution it is assumed that the particles do not interact with each other. However, they do interact with the carrier fluid. Consequently, in a two – fluid approach to aerosol transport the average particle velocity \vec{u}_p is obtained from the average particle momentum equation which may be written as [Fernandez de la Mora and Rosner 1982]

$$\frac{\partial \vec{u}_p}{\partial t} + \vec{u}_p \cdot \nabla \vec{u}_p = \frac{1}{c} \nabla \cdot \Pi_p + \vec{F}_{fluid} \quad (2.15)$$

Where the force per unit mass exerted on the particles by the fluid is denoted by \vec{F}_{fluid} and Π_p is the particle stress tensor.

Based on the assumption of the ideal gas behavior for the dispersed phase, the assumption of constant temperature flow and the general expression for the force fields in the case of Brownian particles described by Ramshaw[1979] and further expanded in order to be applied in the proposed model by Pilou et al.[2011]

The momentum equation yields

$$\frac{\partial \vec{u}_p}{\partial t} + \vec{u}_p \cdot \nabla \vec{u}_p = -\frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c + \frac{1}{\tau_p} (\vec{u}_f - \vec{u}_p) \quad (2.16)$$

Where T_f is the constant fluid temperature, m_p the mass of the particle, K_B the Boltzmann's constant, \vec{u}_f the fluid velocity and τ_p the particle relaxation time. Particle relaxation time is a parameter that characterizes the response of particles to fluid flow changes and 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 . [Drossinos and Housiadas 2006].

A low particle relaxation time expansion of the particle momentum equation is done based on the expression of the particle velocity

$$\vec{u}_p = \vec{u}_p^{(0)} + \tau_p \vec{u}_p^{(1)} \quad (2.17)$$

as proposed by Fernandez de la Mora and Rosner [1982].

The momentum equation (2.16) may be multiplied by the particle relaxation time τ_p and expressed as Eq.(2.18):

$$\begin{aligned} \tau_p \left[\frac{\partial \vec{u}_p^{(0)}}{\partial t} + \tau_p \frac{\partial \vec{u}_p^{(1)}}{\partial t} \right] + \tau_p [(\vec{u}_p^{(0)} + \tau_p \vec{u}_p^{(1)}) \cdot \nabla (\vec{u}_p^{(0)} + \tau_p \vec{u}_p^{(1)})] = \\ = \vec{u}_f - \vec{u}_p^{(0)} - \tau_p \vec{u}_p^{(1)} - \tau_p \frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \end{aligned} \quad (2.18)$$

Eq. (2.18) may be written analytically:

$$\begin{aligned}
& \tau_p \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_p^{(0)}}{\partial t} + \tau_p \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_p^{(1)}}{\partial t} \right] + \tau_p [(\bar{\mathbf{u}}_p^{(0)} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}_p^{(0)} + \tau_p^2 (\bar{\mathbf{u}}_p^{(1)} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}_p^{(1)} + (\bar{\mathbf{u}}_p^{(0)} \cdot \nabla) \tau_p \bar{\mathbf{u}}_p^{(1)} + (\tau_p \bar{\mathbf{u}}_p^{(1)} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}_p^{(0)}] = \\
& = \bar{\mathbf{u}}_f - \bar{\mathbf{u}}_p^{(0)} - \tau_p \bar{\mathbf{u}}_p^{(1)} - \tau_p \frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c
\end{aligned} \tag{2.19}$$

By neglecting the particle relaxation time terms of 2nd order or higher we obtain:

$$\bar{\mathbf{u}}_p^{(0)} = \bar{\mathbf{u}}_f \tag{2.20}$$

and

$$\bar{\mathbf{u}}_p^{(1)} = -\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_f}{\partial t} - (\bar{\mathbf{u}}_p^{(0)} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}_p^{(0)} - \frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \tag{2.21}$$

Therefore the particle velocity is equal to:

$$\bar{\mathbf{u}}_p = \bar{\mathbf{u}}_f + \tau_p \left[-\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_f}{\partial t} - (\bar{\mathbf{u}}_f \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}_f - \frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \right] \tag{2.22}$$

The particle velocity $\bar{\mathbf{u}}_p$ is decomposed into two parts: a diffusive part dependent on the particle concentration and a convective part $\bar{\mathbf{u}}_c$ independent of particle concentration.

$$\bar{\mathbf{u}}_c = \bar{\mathbf{u}}_f + \tau_p \left[-\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_f}{\partial t} - (\bar{\mathbf{u}}_f \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}_f \right] \tag{2.23}$$

The dispersed phase mass conservation Eq.(2.14) takes the form:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot [c(\bar{\mathbf{u}}_c - D \nabla \ln c)] = 0 \tag{2} \tag{2.24}$$

Where $D = \tau_p \frac{K_B T_f}{m_p}$ is the diffusion coefficient of particles given by the Stokes-Einstein equation

Eq.(2.24) can be further written as Eq.(2.25) because $c \nabla \ln c = \nabla c$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \left[c \left(\bar{\mathbf{u}}_f - \tau_p \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_f}{\partial t} - \tau_p (\bar{\mathbf{u}}_f \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}_f \right) \right] = \nabla \cdot (D \nabla c) \tag{2.25}$$

Eq.(2.25) is the extended particle transport equation that incorporates the effects of particle convection, inertia and diffusion. Eq.(2.25) may be expressed in a dimensionless integral form simplified by using the Gauss theorem and assuming constant fluid and particle properties, thus constant diffusion coefficient as Eq.(2.26) .

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \int_s c \bar{\mathbf{u}}_c \cdot d\vec{S} = Pe^{-1} \int_s \nabla c \cdot d\vec{S} \tag{2.26}$$

Where Pe is the Péclet number which stands as the ratio of the convective flux to the diffusive flux of the particles and is defined by:

$$Pe = \frac{d_t u_0}{D}$$

Where d_t is a characteristic length of the flow (i.e. tube diameter) and u_0 is the characteristic velocity of the flow used for the dimensionless approach. Bigger particles, with low diffusion coefficient, will lead to a higher Pe and as Pe increases the convective flux becomes more important than the diffusive one and vice versa.

Numerical solution

Once the fluid velocity is numerically obtained using Ansys CFX software, the convective particle velocity \vec{u}_c is calculated from Eq.(2.23) and, subsequently, the particle transport equation is solved for particle concentration.

Therefore, the particle modified convection diffusion equation (Eq.(2.26)) 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.

For the time discretization of the concentration of the particles a forward Euler scheme was used. Namely the time derivative for the particle concentration was given by Eq. (2.27).

$$\frac{\partial c_{n+1}}{\partial t} = \frac{c_{n+1} - c_n}{dt} \quad (2.27)$$

The typical topology of a Cartesian computational grid for a collocated arrangement of variables and the control volume (CV) are shown in Figure 2.24 The centre of the CV is computational node P, whereas E, W, N, S, T and B are its neighbour nodes and define the respective CV faces e, w, n, s, t and b.

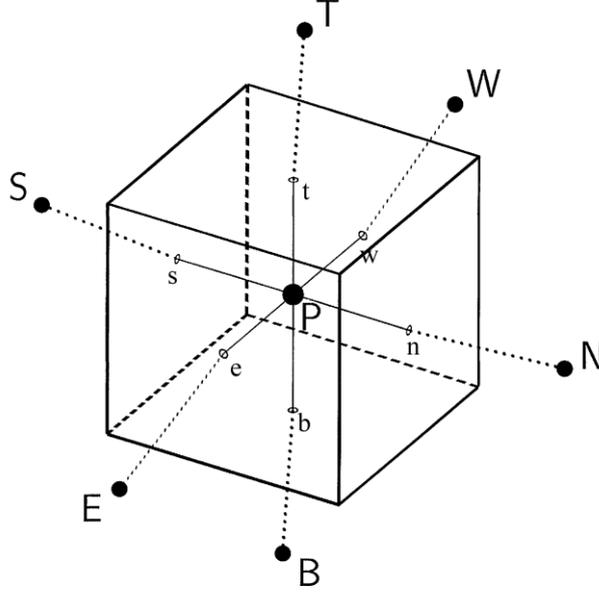


Figure 2.24: Topology of a control volume of a Cartesian grid

The net particle flux through the CV surface equals the sum of integrals over the six CV faces. Thus Eq.(2.26) becomes for every time step:

$$\sum_k \left(\int_{S_k} c \vec{u}_c \cdot d\vec{S} \right) = \sum_k \left(P e^{-1} \int_{S_k} \nabla c \cdot d\vec{S} \right) \quad (2.28)$$

with $k = 1..6$ for each CV face or alternatively:

$$\sum_k (J_k) = 0 \quad (2.29)$$

Where J_k is the total flux through each face, calculated as $J_k = J_k^c + J_k^d$ with

$J_k^c = \int_{S_k} c \vec{u}_c \cdot d\vec{S}$ the convective particle flux and $J_k^d = P e^{-1} \int_{S_k} \nabla c \cdot d\vec{S}$ the diffusive particle flux.

The calculation of the particle convective velocity \vec{u}_c is done by Eq. (2.23) thus concentration c is the only unknown quantity.

The surface integral of the two particle fluxes refer to the six CV surfaces where the particle concentration c has to be approximated. The approximation was done based on a classical finite volume method analysis described in detail by Ferziger and Peric [2002]. The analysis for only the “east” face of a single CV is described and the other faces may be treated in the same manner.

Regarding the convective term, the convective mass flow \dot{m}_e^C through the east CV face is equal to

$$\dot{m}_e^C = \int_{S_e} \vec{u}_c \cdot d\vec{S} \approx u_{c|x_e} S_{e_x} \quad (2.30)$$

where $u_{c|x_e}$ is the x-component of the convective particle velocity \vec{u}_c and S_{e_x} is the x-component of the east face vector. The convective flux through the east face is then approximated by the product of the convective mass flow \dot{m}_e^C times the value c_e of the concentration on the center of the face e according to Eq.(2.31)

$$J_e^c = \int_{S_e} c \vec{u}_c \cdot d\vec{S} \approx \dot{m}_e^c c_e \quad (2.31)$$

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 Peric 2002]. Thus, the convective term is split into an implicit part, $J_{e,imp}^c$ which is discretized using a first order upwind scheme (UDS) and is equal to

$$J_{e,imp}^c = (\dot{m}_e^c c_e)^{UDS} \quad (2.32)$$

, and an explicit part, $J_{e,exp}^c$ comprised of the difference between the UDS and the second-order central difference scheme (CDS) equal to

$$J_{e,exp}^c = \left[(\dot{m}_e^c c_e)^{CDS} - (\dot{m}_e^c c_e)^{UDS} \right]^{old} \quad (2.33)$$

evaluated using the values of the previous iteration.

For the CDS, the value of the particle concentration at the CV face e is approximated by linear interpolation between the nodes P and E according to Eq. (2.34)

$$c_e = \lambda_e c_E + (1 - \lambda_e) c_P \quad (2.34)$$

Where the interpolation factor λ_e stands for the ratio of the distance of face center e from the node P to the distance of node E from node P, thus:

$$\lambda_e = \frac{L_{Pe}}{L_{PE}}$$

For the UDS, the value of the particle concentration at the CV face e is given by :

$$(\dot{m}_e^c c_e)^{UDS} = \max(\dot{m}_e^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_e^c, 0) c_E \quad (2.35)$$

i.e. the value of particle concentration at the face center e equals the one at node P if there is mass flow from P to E or equals to the one at node E if mass flow is from E to P.

In conclusion, J_e^c is written as:

$$J_e^c = J_{e,imp}^c + J_{e,exp}^c \quad (2.36)$$

Concluding to Eq.(2.37)

$$J_e^c = \max(\dot{m}_e^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_e^c, 0) c_E + \{ [\lambda_e c_E + (1 - \lambda_e) c_P] - \max(\dot{m}_e^c, 0) c_P + \min(\dot{m}_e^c, 0) c_E \}^{old} \quad (2.37)$$

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

Regarding the diffusive term, the diffusive particle flux through CV face is given by Eq.(2.38)

$$J_e^d = -Pe^{-1} \int_{S_e} \nabla c \cdot \hat{n} d\vec{S} = -Pe^{-1} \int_{S_e} \frac{\partial c}{\partial n} dS \approx -Pe^{-1} \left. \frac{\partial c}{\partial n} \right|_{S_e} \quad (2.38)$$

Where \hat{n} is the surface unit vector and S_e the surface of the CV face e . The term $\left. \frac{\partial c}{\partial n} \right|_{S_e}$ 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.(2.38) becomes:

$$J_e^d = -Pe^{-1} S_e \frac{c_E - c_P}{L_{PE}} \quad (2.39)$$

The previously described analysis is valid only when a Cartesian totally orthogonal grid is used as a computational domain. In the described model non orthogonal structured grids are used therefore a series of corrections based on Ferziger and Peric [2002] are implemented in order to make the method fully applicable to non orthogonal grids.

Regarding the boundary conditions, a formerly developed analysis by Pilou et al. [2011] has been followed and the particle concentration wall boundary condition was the usual condition of a totally absorbing wall described by Eq.(2.40)

$$c|_{wall} = 0 \quad (2.40)$$

which at the wall boundary gives a (dimensionless) diffusive flux, $J^D|_{wall}$, equal to:

$$J^D|_{wall} = -Pe^{-1} \int_s \nabla c \cdot \vec{dS}|_{wall} \quad (2.41)$$

Moreover, there is a finite non-zero particle convective velocity just before the wall, resulting to a (dimensionless) convective flux, $J^C|_{wall}$, which can be written as:

$$J^C|_{wall} = 0 \text{ if } \vec{u}_c \cdot \vec{dS}|_{wall} \leq 0 \quad (2.42)$$

$$J^C|_{wall} = \int_s c \vec{u}_c \cdot \vec{dS}|_{wall} \text{ if } \vec{u}_c \cdot \vec{dS}|_{wall} > 0 \quad (2.43)$$

where the particle convective velocity, \vec{u}_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 the particles convective flux indicate that only outward fluxes are permitted; influx of particles from the wall is not permitted, because is considered physically unrealistic.

Therefore, the total (dimensionless) deposition flux is given by Eq.(2.44):

$$J_{dep} = J^C|_{wall} + J^D|_{wall} \quad (2.44)$$

2.2.3 Model Validation

Inertia and gravity term validation

The incorporation of the inertia and external forces term in the proposed model has been validated through comparison with experimental [Pui et al. 1987], analytical [Cheng Y. and Wang C. 1975] and other computational data [Tsai C.J. and Pui D. 1990] on the calculation of the deposition fraction of aerosols [Pilou et al. 2011]. Additionally the deposition fraction was compared, with evaluated results, against experimental findings at cases where extra forces are present [Pilou et al. 2013]. Based on those previous simulations the inertia term of the model is considered elaborated enough to simulate inertial particle transfer and deposition.

Transient term validation

The model is further developed in the current study for the simulation of unsteady flows and the validity of the additional transient term has to be evaluated. The validation of the transient term was done through comparisons with a problem that has analytical solution. To our knowledge there is no comparable study of transient particle transport and deposition of inert particles in the literature and a comparison against steady state experimental and numerical studies have been done in the past [Pilou et al. 2011; 2013]. Thus a comparison against a case which does not take particle inertia into account is carried out.

Siegel and Sparrow [1959] analyzed the transient laminar heat transfer in the thermal entrance region of a flat duct (parallel plate channel) whose bounding surfaces are subjected to a constant heat flux. The velocity distribution of the flow was taken to be fully developed and steady. The developed code was used for the simulation of the forced convection heat transfer in the entrance region of a flat duct and the results are compared with the aforementioned study. The reproduction of the test problem was done by the model with the particle size taken equal to zero. The reproduction of the benchmark problem, at fully developed temperature phase, is illustrated in Figure 2.25.

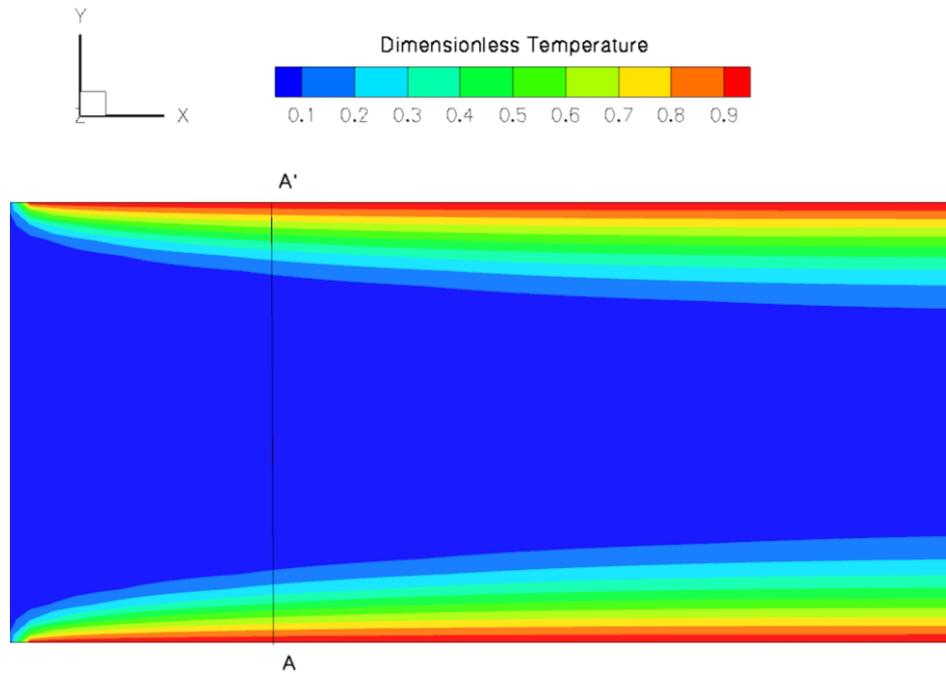


Figure 2.25: Thermal boundary layer development in the entrance region of a flat duct with bounding surfaces subjected to a constant heat flux.

In Figure 2.26 the comparison for different dimensionless time steps is illustrated. The agreement of the numerical simulations with the analytical results is very good.

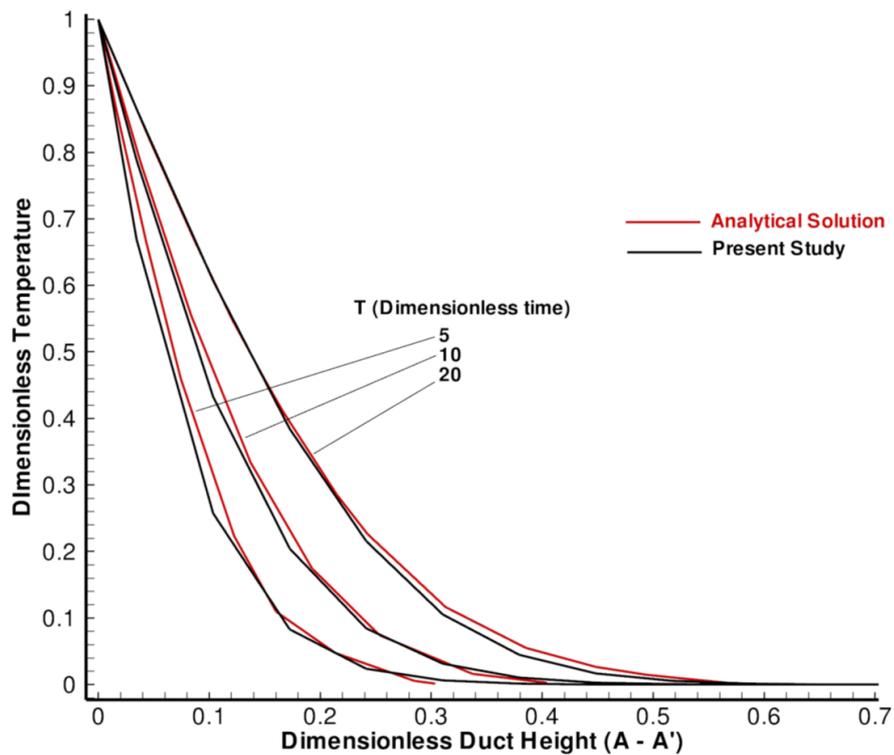


Figure 2.26: Comparison of numerical and analytical solution of transient Temperature development inside a flat duct with bounding surfaces subjected to a constant heat flux.

Overall this comparison demonstrates that our numerical treatment of the transient term is valid and our model is elaborated enough to simulate time dependent particle transport problems.

2.2.4 Conclusion

In this sub chapter the theoretical background about particle transport and deposition and the numerical approach, on which the proposed methodology is based, are presented.

The numerical simulation of the air flow field is carried out by the commercial software Ansys CFX® and for the calculation of the fluid flow fields the incompressible time dependent Navier – Stokes equations are solved by the finite-volume method. The model assumes one-way coupling, thus the influence of the dispersed (particulate) phase on the fluid flow field is considered negligible.

Regarding the dispersed phase, after a brief introduction to modelling of particle transport and deposition and the processes present in a two-phase fluid-particle systems, a detailed description of the handling of the equation that governs the transport of particles (PTE), is given.

Internal aerosol processes are not taken into account in this model because they are not important for the applications considered. Moreover, the low particle relation time expansion of the particle average momentum equation in case of isothermal 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 may be decomposed in 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, its temporal and spatial gradients and incorporates the effects of particle inertia.

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 in an Eulerian formulation.

The particles transfer 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 and a forward Euler scheme for the time discretization of the concentration of the particles. Furthermore the validation of the incorporation of the inertia and transient term achieved through comparisons with a problem that has analytical solution.

The proposed model is a fully Eulerian approach, for both air and particle phases. The advantages of the Eulerian approach combined with a particle transport analysis that incorporates particle inertia and diffusion at the same time provided us with a powerful Computational Fluid Particles Dynamic (CFPD) model that can give insight into the particle transfer and deposition in unsteady flows.

Applications

3

3.1 A patient –specific abdominal aortic aneurysm (AAA) model

In the current application the generation of a multi-block structured grid on a real abdominal aortic aneurysm (AAA) acquired from DICOM data is presented. With the use of medical images in standard DICOM format (output of a computed tomography (CT) exam), the shape of a human organ is extracted and a structured computational grid is created. The structured grid generation is done by the proposed method and enables the development of an advanced patient specific model. The proposed methodology provides a precise reconstruction of the human organs, that is required in an AAA case, where small variations in the geometry may alter the flow field, the stresses exerted on the walls and finally the rupture risk of the aneurysm

3.1.1 Patient specific geometry and grid generation

The generation of an advanced patient specific model of the physical shape of a human organ from medical imaging data is described for the case of an AAA, and it comprises of the following steps:

- DICOM data processing and segmentation of the volume of interest.
- Creation of a 3D shell of the AAA by a medical imaging program.
- Generation of a surface structured grid of the shell of the three dimensional shape.
- Generation of the volume grid and grid refinement by an in-house 3D elliptic grid enhancement code.

In the next subsections a detailed description of these steps is given.

Image processing - Geometry reconstruction

The first step in our methodology is to read a DICOM file. Currently almost all the medical imaging methods (magnetic resonance imaging (MRI), computed tomography (CT), medical ultrasonography (MU) etc.) and medical imaging machines export their results in DICOM format. A DICOM file consists of a set of grey-scale images of planar cross sections of the volume of interest. Geometry reconstruction from DICOM data sets is considered to be a routine task today and is utilized by locally customized codes or commercial software. In this study, the highly efficient and reliable open source software 3DSlicer[®] [Pieper et al. 2006] is used.

For the AAA case study, CT anonymous data were obtained from the databases of the Diagnostic Medical Center: Encephalos – Euromedica. These data were acquired with the standard contrast and resolution CT protocol (plane resolution is 512 x 512 pixels and slice thickness is 2 mm).

An important step in the image reconstruction process is the segmentation of the volume of interest. Due to the heterogeneous nature of signal intensity distribution and quality of the DICOM images, this procedure can not be automated. A certain degree of user intervention is always required during the segmentation, mainly in the identification of the shape bounds.

In the case of AAA, many studies examine methods to segment the volume of interest when a thrombus is present [Lee et al. 2010]. The thrombus develops in the inner vascular wall. So, the optical separation between thrombus and the outer AAA's vascular wall is necessary. Due to a difference in the biochemical synthesis, the

thrombus produces a different optical result in a DICOM file. Hence, by using luminescence thresholds it is possible to distinguish thrombus from the AAA's outer vascular wall.

In this application, the segmentation of only the inner part of the AAA, without the thrombus, is done, as this is the area where the flow field is developed. In Figure 3.1, the segmentation of the inner part of an AAA, using luminescence thresholds is shown. For better optical result, a line is drawn on the boundaries of the selected area.

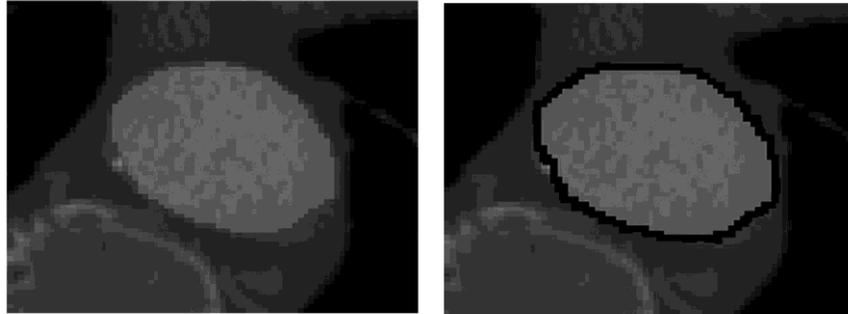


Figure 3.1: (Left) A typical image of a DICOM data set from medical examination of an AAA case. (Right) The same image with the area of interest highlighted.

After the segmentation of the volume of interest, the 3D Slicer® software produces a 3D surface cell by combining the data of every two planar images, while using an interpolation method in the third dimension. After the reconstruction a smoothing filter is applied by the use of the 3D Slicer® software. The result of this procedure is exported as an STL file (STL is a file format native to the stereo-lithography CAD software) which describes the outer shell of the shape with the use of triangles. An STL file describes a raw unstructured triangulated surface with the unit normal vector and the location of the vertices (ordered by the right-hand rule) of the triangles using a 3D Cartesian coordinate system. The STL file used in the AAA case study is visualized in Figure 3.2. Nevertheless, the methodology can be applied to every triangle-based description of a surface.



Figure 3.2: The image of an AAA in STL format created by the 3D Slicer®.

Grid generation

In the grid generation section the production of a structured grid with fine detail and respect to the surface shape is presented. This procedure is done by a FORTRAN code developed for the needs of the methodology, which is based on the theory developed in a previous chapter of the manuscript.

The grid generation procedure is comprised of the following steps:

- Separation of the 3D shape to two shells.
- Generation of the surface structured grid.
- Union of the two separate structured shells to one.
- Creation of a grid clustering area near the artery wall.
- Creation of the initial inner grid, using a simple transfinite interpolation (TFI) method.
- Refinement of the grid according to the physical problem.

Separation of the 3D shape to two shells

Although the developed algorithm for structured surface grids works only on open manifolds, the 3D cell shape created by the 3D Slicer[®] software is a closed manifold. Therefore, the surface was split into two open manifolds, forming two shells. This was done by the application of a simple spatial filter, which separates the triangles of the geometry in two groups. The first group forms the right shell and the second group forms the left shell. The surface structured grid generation is done on each shell, separately.

Generation of the surface structured grid

The first step in the procedure is the creation of an isomorphic parameterization for surface triangulation following the theory of Floater [Floater et al. 2005]. From the application of Floater's algorithm to a surface triangulation in R^3 , a planar triangulation in a predefined two dimensions ($2D$) domain, with a one-to-one correspondence between nodes, edges and faces is formed. This is done by solving a linear system of equations of the conservation of convex combination factor for every triangle in R^3 and for the newly calculated triangles in $2D$.

In Figure 3.3, a surface triangulation and an isomorphic planar triangulation produced by the previously described algorithm is shown.

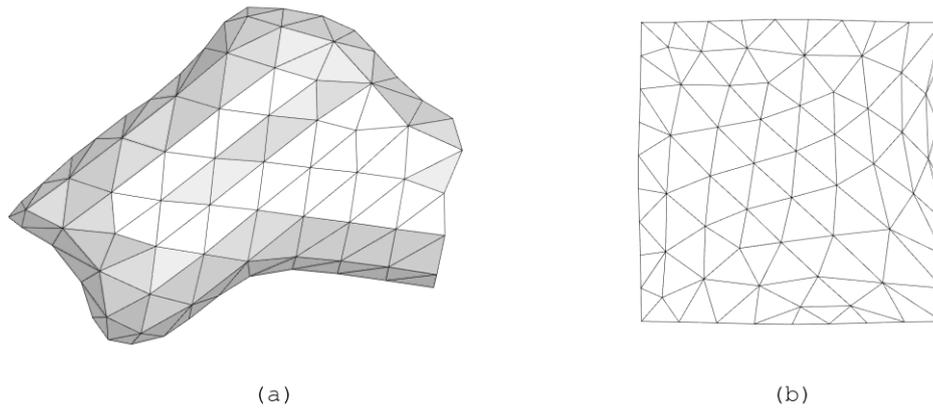


Figure 3.3 : (a) A surface triangulation . (b) An isomorphic planar triangulation with one-to-one correspondence between nodes, edges and faces.

The second step is the use of the isomorphic mapping to produce a structured surface grid. Due to the isomorphic transformation, the calculated barycentric coordinates are preserved in the surface triangulation. Using that information, along with a simple transformation, a surface structured grid over the surface triangulated shape is obtained. More details about this procedure and the mathematical formulation can be found in a previous chapter of the manuscript.

In Figure 3.4 the surface structured grid obtained by the methodology and the starting surface triangulation is shown.

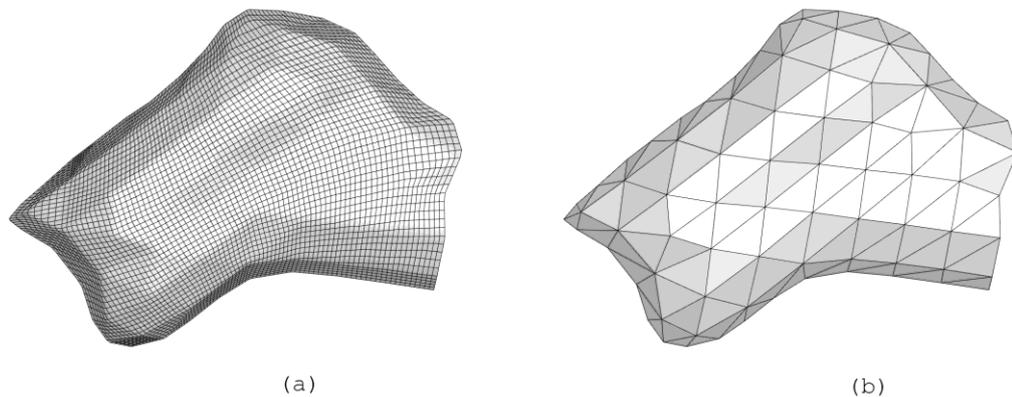


Figure 3.4 : (a) A surface structured mesh which accurately conforms to the surface shape. (b) The surface triangulation .

When this methodology is applied to the AAA case, however, a more sophisticated approach has to be followed. Due to the complexity of the shape of the surface triangulation, produced by the separation of the aneurysm geometry, the previously described methodology is not directly applicable to this geometry.

The main problem is that the outer curves of the surface triangulation of the AAA may have irregular outline. The irregular outline may be formed by boundary triangles which stand out by the surface smooth bound. That type of boundary triangles contains two boundary edges. If the formerly mentioned methodology is applied to those triangles, the boundary edges will be placed in a straight line on the $2D$ square domain so they will not form a triangle anymore. As a result, the exact shape can not be fully reproduced and piece of information is lost.

The proposed methodology overcomes this limitation, as follows: Without violating theory, a convex curved $2D$ domain is used. The four sides of the domain that is used are produced analytically by four Eqs. (3.1 – 3.4),

$$y = -cur * (1 - \cos(2\pi x)) \text{ for } x \in [0,1], \quad (3.1)$$

$$x = 1 + cur * (1 - \cos(2\pi y)) \text{ for } y \in [0,1], \quad (3.2)$$

$$y = 1 + cur * (1 - \cos(2\pi x)) \text{ for } x \in [0,1], \quad (3.3)$$

$$x = -cur * (1 - \cos(2\pi y)) \text{ for } y \in [0,1]. \quad (3.4)$$

The four equations are for each of the four sides of the domain, and cur is the variable that defines the curvature of the $2D$ domain bounds. The use of a curved domain allows a triangle with two boundary edges, on the surface triangulation, to form a triangle in the planar triangulation. With the use of a curved domain, as a parametric domain, the developed code can be applied to surface triangulations of complex shape, without losing any information. The triangulation and the structured grid obtained in the domain created for cur equal to 0.015 are visualized in Fig 3.5.

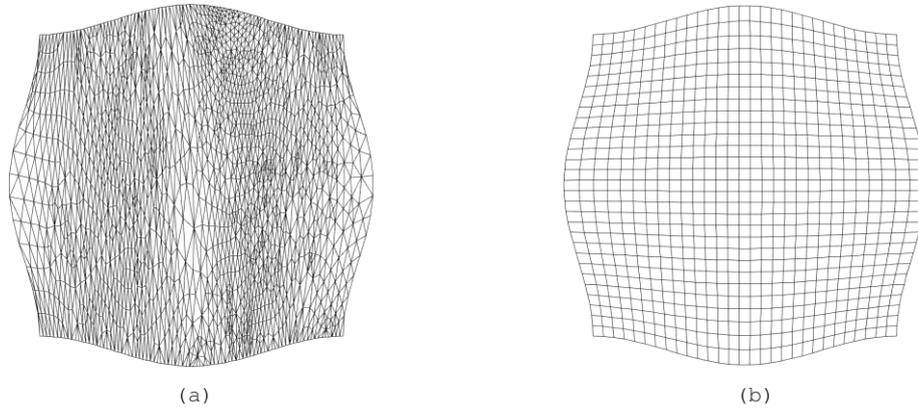


Figure 3.5: (a) The planar triangulation of the left shell of an AAA. (b) The structured mesh calculated in the 2D domain to be interpolated in the planar triangulation.

The utilization of the method in a shell of the AAA shape is shown in Figure 3.6. On the left side of figure 3.6 the triangular surface of the AAA shell is visualized, on the right side of the figure the surface structured grid obtained by our methodology is visualized.

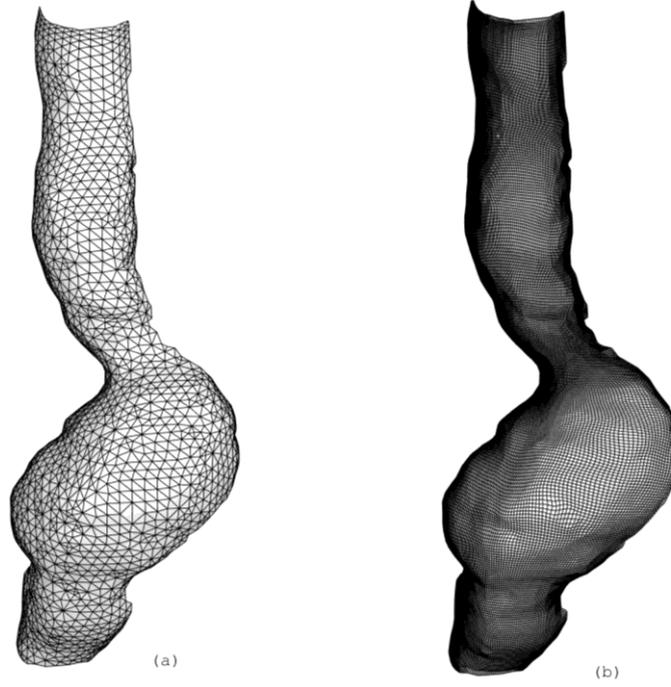


Figure 3.6: (a) The left shell of an AAA taken from an STL file. (b) A surface structured mesh of the shell generated by the proposed methodology.

The number of elements of the surface grid is equal to the number of elements of the planar structured grid that were projected on the planar triangulation. As a result the number of elements of the final grid can be controlled through the control of the projected planar grid.

Union of the two shells –Creation of the grid clustering area -Creation of the initial inner grid - Grid enhancement

After the surface structured grid is generated over the two shells, the two shells are united and a new surface structured grid is formed. That grid will be used for the generation of the inner domain.

For the creation of the inner domain the normal vector of every point on the surface is calculated by the Eq. (3.5),

$$N = \frac{\vec{g}_1 \times \vec{g}_2}{|\vec{g}_1 \times \vec{g}_2|} \quad (3.5)$$

where \vec{g}_1 is the first and \vec{g}_2 is the second covariant metric of the curvilinear coordinate system that conforms to the surface grid that was generated. By writing the curvilinear covariant metrics in terms of the Cartesian coordinate system, Eq. (3.5) can be expressed as in Eq. (3.6).

$$N = \frac{\frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta}}{\left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \right|} = \frac{\left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \vec{i} - \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \vec{j} + \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \vec{k}}{\left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \right|} \quad (3.6)$$

Where \vec{r} is the position vector, and ξ and η are the curvilinear coordinates, often referred in discrete form as i and j .

Based on the Normal vector values calculated, the surface grid points are extruded towards the inner of the AAA. The distance of the extrude operation is selected along with the number of hexahedral elements created. By controlling those two parameters, multi-block grids that cluster near the AAA wall are produced. Precautions are taken to avoid the grid overlapping. Grid overlapping is possible to appear if the extrude distance is large compared with the AAA diameter or grid points with extremely high curvature are present. To avoid this situation, extrude distances comparable with the arteries wall thickness (assumed 1.5 mm based on [Kleinstreuer et al. 2006]) are selected.

The next step is the creation of an initial 3D grid using the linear transfinite interpolation (TFI) method [Gordon W. N. and Hall C.A. 1973]. The result of this procedure is a multi-block structured grid with the ability to fully control the grid clustering near the AAA walls by specifying the number of elements near the wall and the length of the cluster layer.

The grid refinement, according to the physical problem computational needs and with respect to the surface shape is following. The refinement is done by an in-house code for 3D grid enhancement based on the solution of elliptic partial differential equations, developed according to Thompson et al. [1999].

The result of our methodology is the multi-block structured computational grid depicted in figures 3.7 and 3.8. The grid conforms to the surface of the AAA and with the application of a 3D grid enhancement code together with the multi-block technique a local clustering of elements can be applied near the walls.

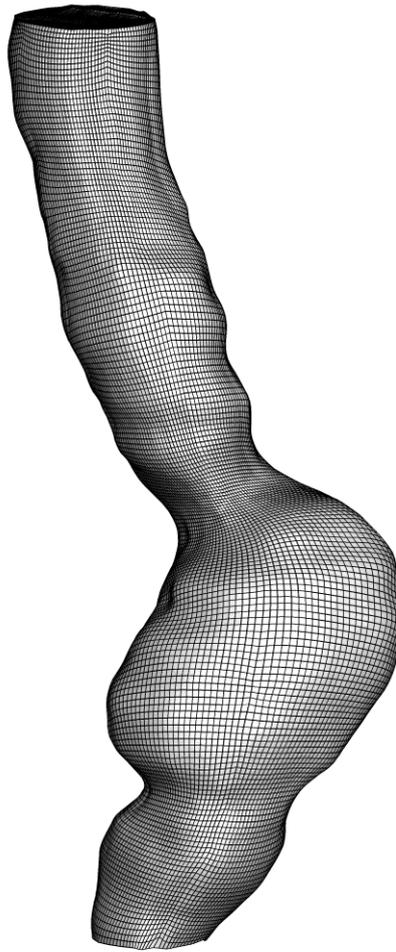


Figure 3.7: A realistic AAA geometry modelled by a structured computational grid generated by the proposed methodology

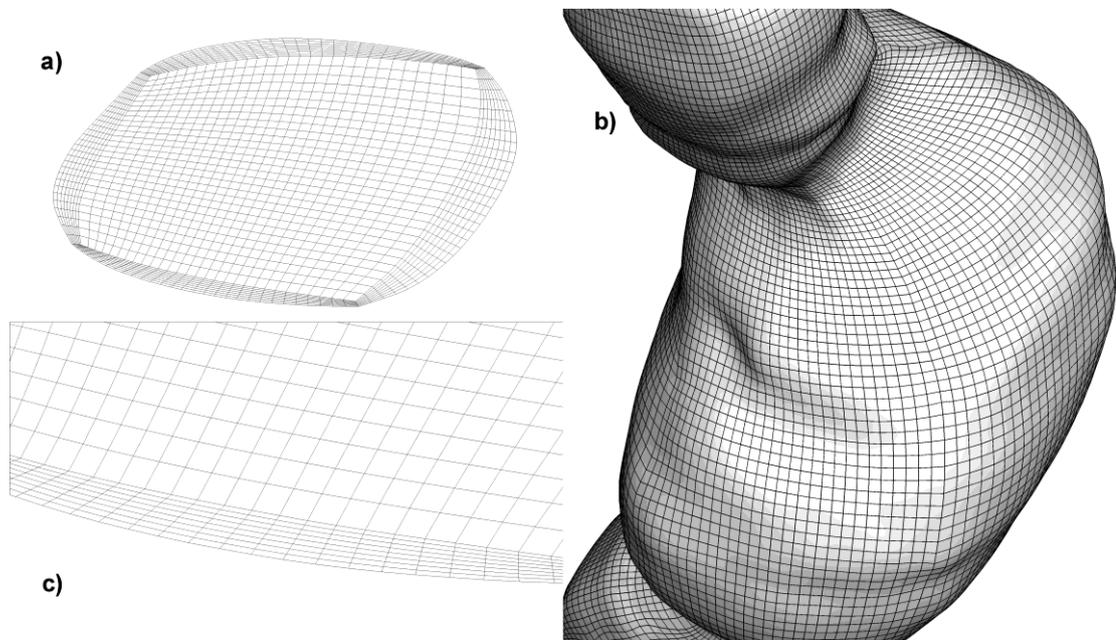


Figure 3.8 : (a) A grid slice from the inner of the 3D structured mesh of the AAA that has been modeled. (b) Detail from the outer surface of the same domain. (c) A detail of the same grid slice.

For the computational domain depicted in Figure 3.8, the calculation of a grid skewness metric is done (SKM). The skewness metric is defined as the result of the Eq. (3.7) calculated for every hexahedral element.

$$SKM = \max\left(\frac{\theta_{\max} - 90}{90}, \frac{90 - \theta_{\min}}{90}\right), \quad (3.7)$$

In Eq. (3.7), θ_{\max} is the maximum angle and θ_{\min} is the minimum angle in the hexahedron element. The 0.0 value corresponds to a perfect equiangular element while value 1.0 corresponds to an absolute skew element. The skewness metric results, for a computational domain consisting of 316.651 elements with an element cluster distance equal to 2,5 % of the AAA diameter, are presented in the Table 3.1.

Skewness metric	Number of Elements	Percentage %
0.0 - 0.25 (excellent)	224845	71,00
0.25 - 0.50 (good)	89226	28,19
0.50 - 0.75 (medium)	2580	0,81
0.75 - 1.00 (poor)	0	0,00
Sum	316651	100,00

Table 3.1: Skewness metric for the 3D structured grid.

The results are classified in four groups. The number of elements and the overall percentage that belongs to each group are visualized. The classification and the characterization of the grid quality classes are based on empirical rules.

The produced grid is a high quality grid with the major percentage of its elements in the “excellent” quality class and almost no elements below the “good” class. The high quality of the produced grid, the element alignment with the primary flow direction combined with the ability of clustering elements near the wall, ensure that the use of the structured grid generated by the proposed methodology may provide accurate computational results, especially near the artery wall.

Numerical optimization - Data type

The system of equations, utilized by the proposed methodology, is solved with the non-commercial solver MUMPS [Amestoy et al. 2001,2006]. MUMPS is a direct solver using the multi frontal method and it utilizes the MPI protocol to run in parallel mode on a computer cluster to reduce computational time.

The structured grid that is created can be exported as a simple multi-block format grid like Plot3D and Tecplot® data format. An additional ability of the set of codes developed for the method is the export of the grid as a CFD general notation system (CGNS)[Poirier et al. 1998] structured grid. The CGNS is a general, portable, and extensible standard for the storage and retrieval of computational fluid dynamics (CFD) analysis data firstly developed by the American Institute of Aeronautics and Astronautics. This data format is compatible with many commercial (Ansys CFX®, Ansys Fluent® etc.) and open source CFD solvers (OpenFOAM® etc.).

3.1.2 Results of the simulation of the blood flow inside the AAA

In this section a brief comparison of results of the simulation of the blood flow inside the abdominal aorta aneurysm computed using a structured grid generated by the proposed methodology and an unstructured grid generated by the commercial software Ansys ICEM CFD®, are presented. The unstructured grid is a grid generated using the advancing front method and consists of 362.602 tetrahedral elements. While the structured grid produced by the proposed methodology, is a grid that consists of 316.651 hexahedral elements. The two domains can be characterized as similar grid resolution domains. The computational domains that have been used in the simulation of the blood flow inside the AAA are shown in figure 3.9. On the left side of figure 3.9 the unstructured grid is visualized, on the right side of the figure the multi-block structured grid generated by the proposed methodology is visualized.

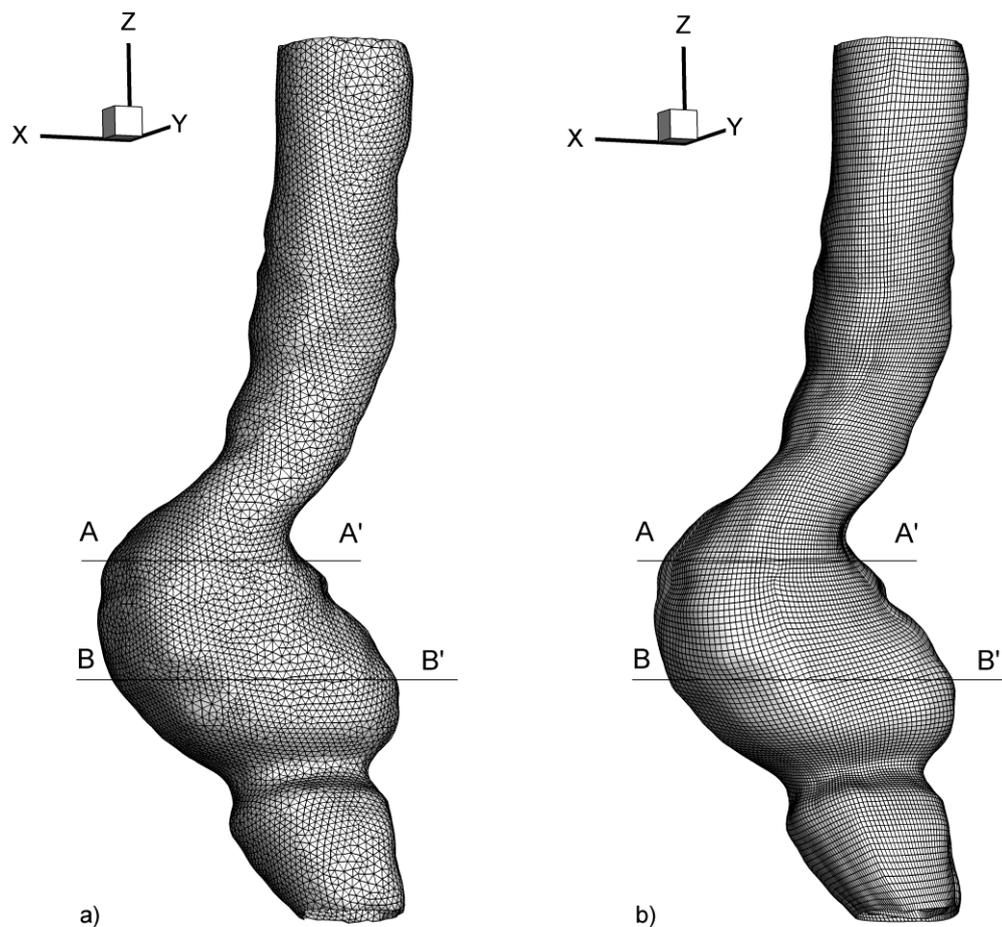


Figure 3.9 : (a) The unstructured computational domain of the AAA created by the Ansys ICEM CFD® software. (b) The structured computational domain of the AAA created by the proposed methodology.

The blood flow simulation is a steady flow corresponding to the maximum inflow velocity at the systolic phase of the cardiac cycle [Li and Kleinstreuer 2007]. The flow field is calculated by the Ansys CFX® software and the blood is simulated to be incompressible, homogenous and Newtonian fluid. The blood density was

taken equal to 1056 kg/m^3 [Li and Kleinstreuer 2007] and the dynamic viscosity equal to $3,1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$ [Li and Kleinstreuer 2007]. As boundary conditions, a constant velocity profile was taken giving a Reynolds number equal to 2000, while the outlet pressure was taken equal to 112 mmHg [Li and Kleinstreuer 2007]. The walls were considered smooth and the no slip condition was applied. The performed CFD simulation, for both domains, predicted a pressure and velocity distribution in the physiological range and corresponded to the expected values reported in previous studies [Li and Kleinstreuer 2007].

In order to visualize the differences of the calculated flow fields of the two domains, two planar sections, one in the upper area and one in the middle of the aneurysm (as shown in figure 3.10), were depicted in figure 3.10. On the left side of the figure 3.10 the two planar sections originate from the unstructured grid are visualized. On the right side the same planar sections originate from the structured grid are visualized. A contour of the velocity magnitude is used in order to make the differences between the calculated flow fields visible. A visual comparison between the velocity contours of the two different grid types, suggests that the use of the structured grid provided more detailed flow fields.

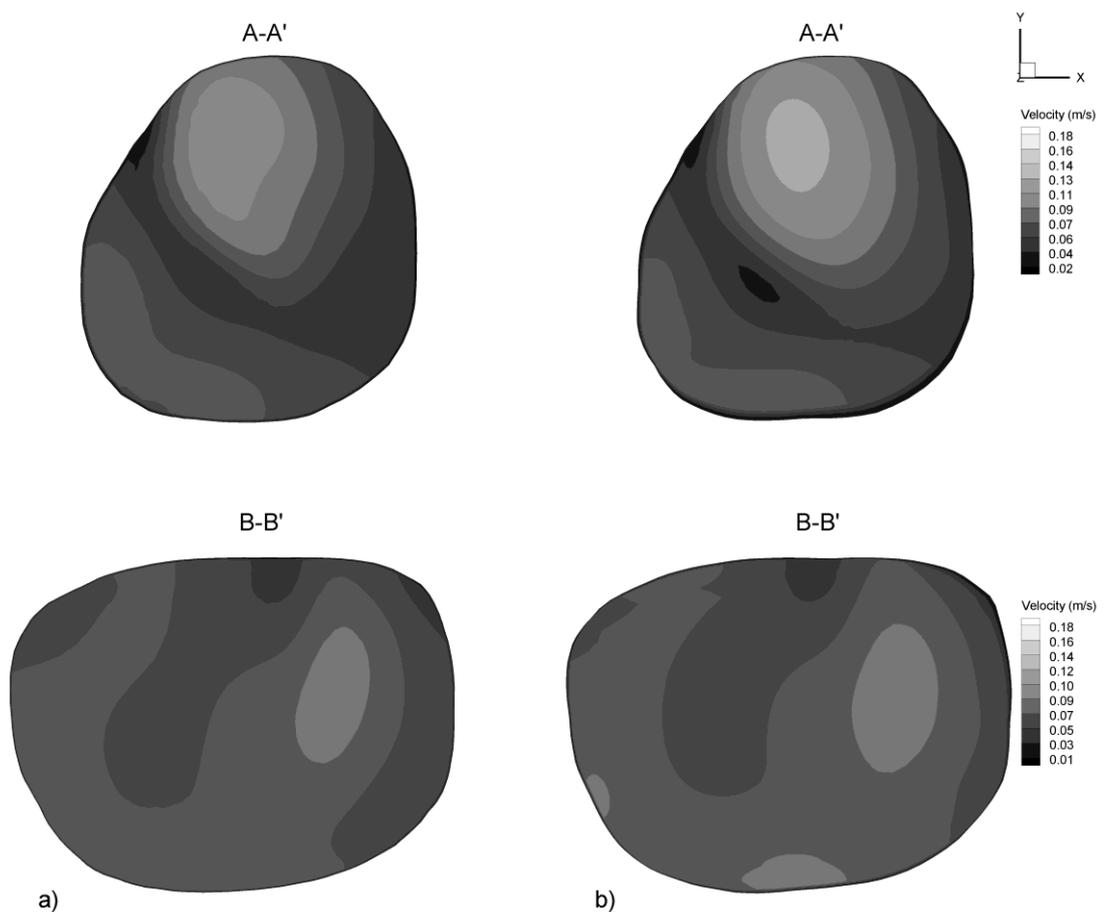


Figure 3.10: (a) Two Planar sections of the AAA along with a velocity contour at the unstructured grid. (b) Planar sections of the AAA along with a velocity contour at the structured grid.

In order to quantify the difference of the flow fields developed inside the two different computational domains, a relative error measurement is done. For that purpose Eq. (3.8) calculates the formula of the relative error variable at selected geometrical points and Eq. (3.9) calculates the root mean square value of the same variable (\mathcal{E}_{rms}).

$$\mathcal{E}_i = \left| \frac{u_{i,coarse} - u_{i,fine}}{u_{i,fine}} \right|, \quad (3.8)$$

$$\mathcal{E}_{rms} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{180} \mathcal{E}_i^2}{180}}, \quad (3.9)$$

For the estimation of the relative error a line consisting of 180 points close to the vascular centreline is selected. The formula is comparing the values of the same geometrical points in both computational domains. The results of the computed velocity coordinates X and Y are depicted on Figure 3.11 and Figure 3.12 as graphs. In the flow field of the AAA simulation the primary flow direction is towards the Z axis. The two coordinates were selected not to be the dominant flow direction coordinates in order to better estimate the ability of the computational domain to simulate the secondary flows inside the AAA.

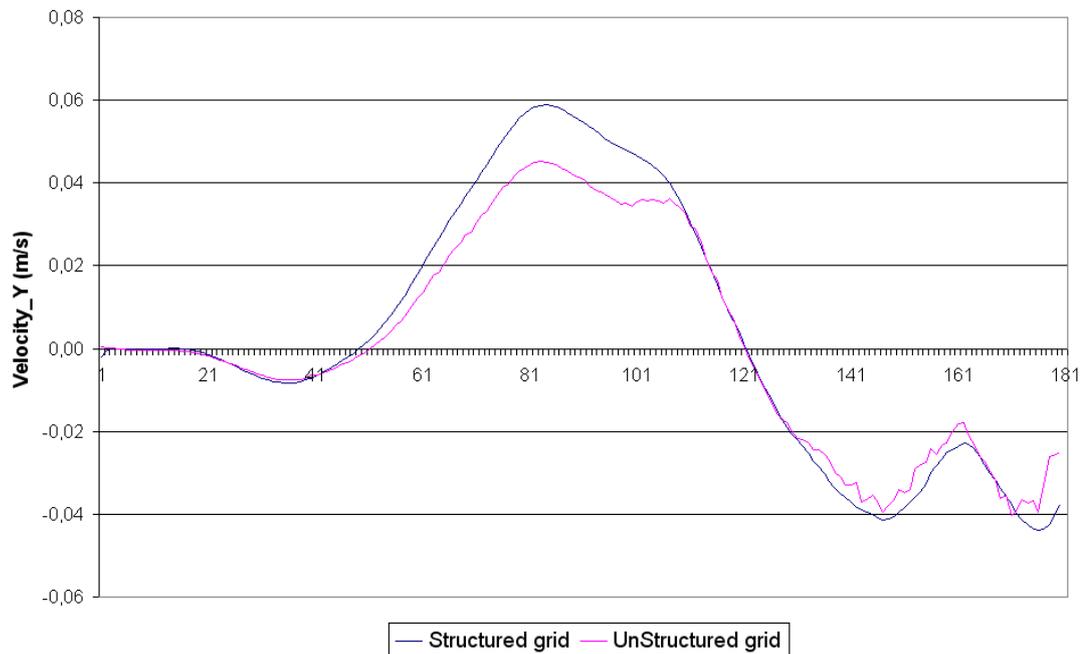


Figure 3.11: The Velocity coordinate Y calculated on 180 points for both computational domains.

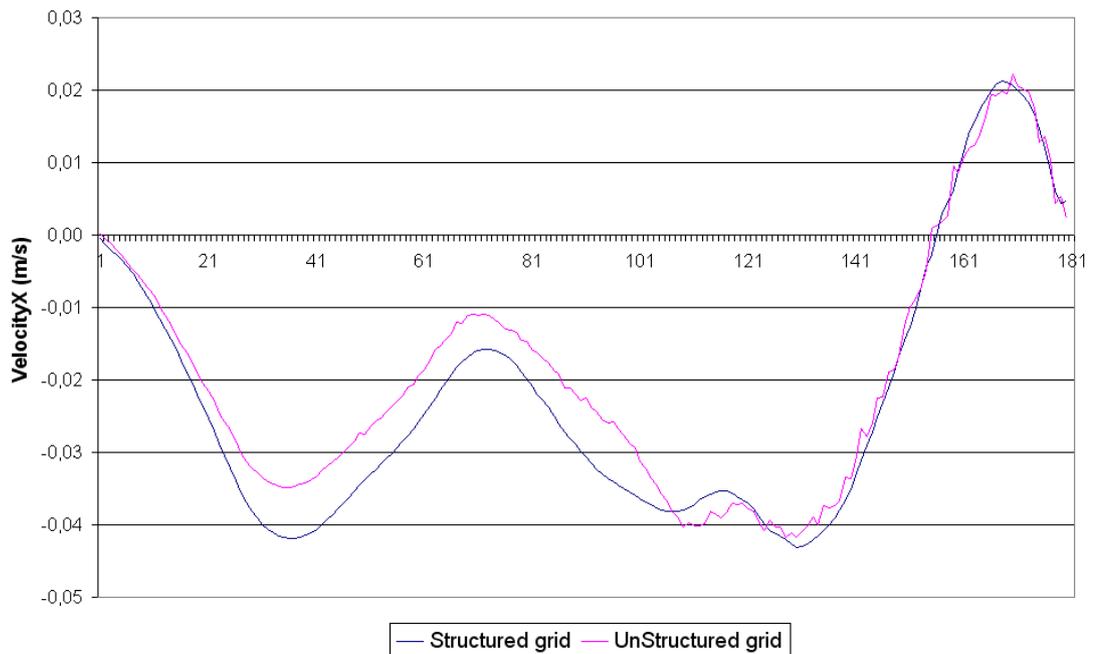


Figure 3.12: The Velocity coordinate X calculated on 180 points for both computational domains.

Based on the two graphs we may suggest that the use of the structured grid provided more smooth flow fields. The unstructured grid shows evidence of high numerical skewness with the occurrences of curly lines and rough velocity transition over neighboring geometrical points. Furthermore the unstructured grid computed the secondary flow velocity coordinates (Velocity_X and Velocity_Y) with lower magnitude. In terms of ϵ_{rms} the Velocity_Y is underestimated by an ϵ_{rms} equal to 2,05 while the Velocity_X is underestimated by an ϵ_{rms} equal to 4,15. Those facts lead the structured grid to be more accurate in the simulation of secondary flows and resolve more secondary vortices inside the flow field. Furthermore, the result of the underestimation of the secondary velocities by the use of the unstructured domain, may lead to a calculation of lower vertical pressure on the wall and a shear strain rate underestimation.

Although a brief comparison between the two grid types is performed in this study, the observed differences and the visualization of the flow fields obtained by the two different computational grids is in agreement with conclusions reported by previous comparison studies [Longest W. and Vinchurkar 2007; Vinchurkar and Longest W. 2008], considering the structured grid more accurate at the flow field calculations at similar grid resolution.

3.1.3 Comparison of the shear stress estimation from different grid types

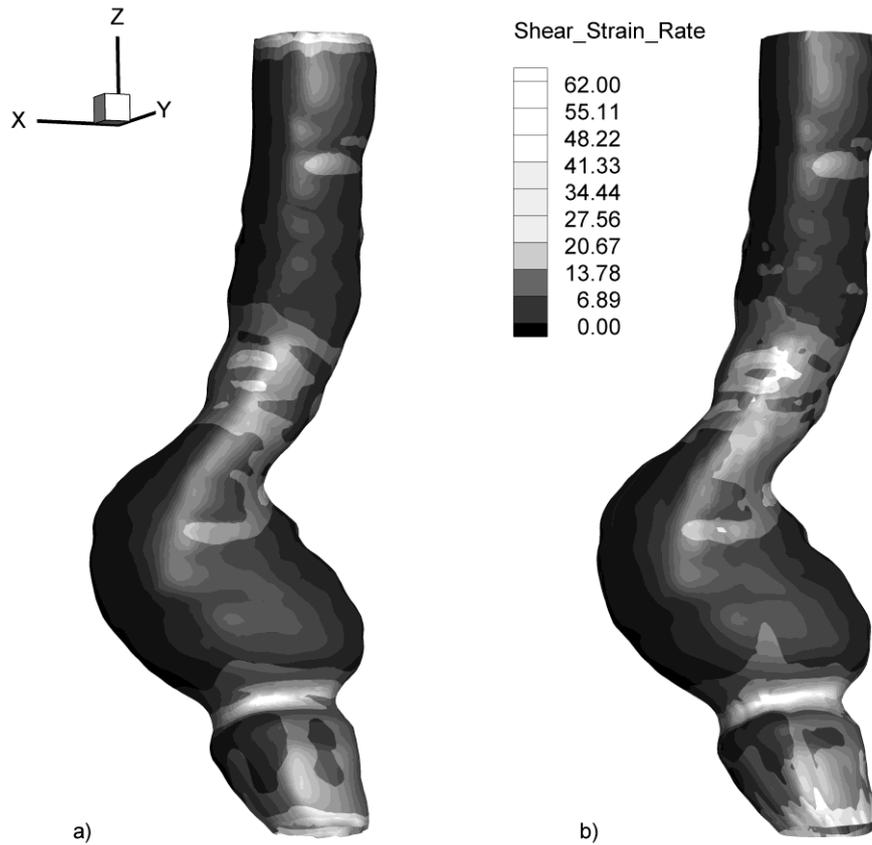


Figure 3.13: (a) A contour of the shear strain rate on the walls of the unstructured domain. (b) A contour of the shear strain rate on the walls of the structured domain.

In figure 3.13, a contour of the shear strain rate on the AAA walls calculated for both domains by Ansys CFX® is presented. As it is visible by figure 3.13 the unstructured grid calculated lower shear strain rate at every AAA area, with an exception of the area circumferential to the inlet of the domain. That calculation of a higher shear strain rate circumferential to the inlet walls, by the unstructured domain, may be a consequence of the poor alignment between the inlet velocity vector and the tetrahedral elements of the grid. For a more detailed measurement of the differences of the computed flow fields, the maximum values of the velocity vector coordinates and the shear strain rate for the two domains are presented in Table 3.2.

Variable	Structured domain	Unstructured domain	Difference (%)
Velocity magnitude (cm/s)	18.93	18.24	3,65
Velocity_X (cm/s)	9.21	8.80	4,45
Velocity_Y (cm/s)	12.38	11.61	6,22
Velocity_Z (cm/s)	15.99	16.88	-5,57
Shear Strain Rate	61.91	56.20	9,22

Table 3.2: Maximum velocity and shear strain rate computed on the two domains.

In the flow field of the AAA the primary flow direction is towards the z axis. The comparison of the maximum magnitude of the three velocity coordinates showed, that the structured grid computed the secondary flow velocities (Velocity_X and Velocity_Y in Table 3.2) with higher values. That fact can lead the structured grid to be more accurate in the simulation of secondary flows and resolve more secondary vortices in the flow field. On the other hand, the result of the underestimation of the secondary velocities by the use of the unstructured domain, may lead to a calculation of lower vertical pressure on the wall and a shear strain rate underestimation. For the specific simulation the assumption is fulfilled and the maximum shear strain rate computed for the unstructured grid is lower, than the maximum shear strain rate computed by the structured domain, for a percentage of 9,22 % .

3.1.4 Conclusions

In an AAA case, the flow domain is formed in an unpredictable shape and may affect the flow field and the rupture risk. Many previous computational model studies tried to reconstruct the AAA shape and computational domain based on statistical data or values measured by a medical exam. Those methodologies have the disadvantages of the suppression of the small abnormalities of the AAA, in the final shape. Other studies used an unstructured computational grid to reproduce the AAA shape conciliated with the limitations of the unstructured grid. In this application an effective computational technique was applied for the development of a detailed shape reconstruction and structured grid generation of a patient-specific AAA case, using DICOM data obtained by a medical imaging examination.

Starting from a set of plane grey-value images taken from a medical imaging examination, a three dimensional shape is reconstructed with the use of the 3DSlicer® software. From that shape a multi-block structured computational grid which conforms to the surface and with a grid spacing control ability near the artery walls is created. The created structured grid was used to study the flow field in an AAA, compute the wall shear stress (wss) and conduct a rupture risk assessment for a specific human.

The methodology presented in this study is a step towards the development of an advanced patient specific model. The combination of this model with computational fluid dynamics models, and fluid-structure interaction models, may provide an accurate patient specific medical diagnosis and prognosis.

3.2 Generation of multi-block computational structured grids from medical imaging of arterial bifurcation

In this application the generation of multi-block structured computational grid on patient-specific bifurcation geometries is presented. The structured grid generation technique is applied to data obtained by medical imaging examination, resulting in a surface conforming, high quality, multi-block structured grid of a patient specific abdominal aorta bifurcation. For the evaluation of the grid produced, a grid convergence study and a comparison between the grid produced by the proposed method and unstructured grids produced by commercial meshing software are carried out.

This section is structured as follows: At first, the methodology is presented, including a description of the way the process of the medical imaging data and geometrical reconstruction is carried out leading to a triangulated surface shape (STL file). This is followed by detailed description of the multi-block structured grid generation process. In addition some details of grid enhancement are described. In the last subsection, numerical results are given including a grid convergence - quality study, a brief flow field solver comparison between Ansys CFX and an in-house Finite Volume solver and a comparison between the abdominal aorta bifurcation grid produced and unstructured grids produced by commercial mesh generation software.

3.2.1 Patient specific geometry and grid generation

The purpose of the methodology is to generate a framework to model a patient specific bifurcation geometry starting from Digital Imaging and Communications in Medicine (DICOM) data acquired by a medical imaging examination. The proposed approach is exemplified with the case of an abdominal bifurcation: It comprises the following steps:

- Reading and processing of medical imaging data in DICOM format and image segmentation - reconstruction of the volume of interest (VOI).
- Geometry preparation – topological partition of the triangulated surface .
- Generation of a multi-block surface structured grid over the partitioned triangulated surfaces
- Unification of the partitioned branches and generation of the volume grid. Grid enhancement by an in house grid enhancement code.

A detailed description of the steps follows

DICOM data processing and segmentation of the volume of interest

Currently almost all the medical imaging machines export their results in a set of grey-scale images of planar cross sections compacted in DICOM format. Many studies have been made in the segmentation and reconstruction of the geometrical shape of interest by combining those images [Antiga L. et al. 2002;2008, Shim M. B. et al. 2009]. Geometrical reconstruction from DICOM data sets is considered to be a routine task today and is utilized by locally customized codes or commercial software. In this study, the highly efficient and reliable open source software 3DSlicer® [Pieper et al. 2006] is used.

For the sample bifurcation study, CT anonymous data were obtained from the databases of the Diagnostic Medical Center: Encephalos – Euromedica. The sample data come from a CT using standard contrast and resolution CT protocol, that is with a plane resolution 512 x 512 pixels with a slice thickness of 2 mm.

In the image reconstruction process an important step is the segmentation of the volume of interest. There is no automated method of segmentation, due to the heterogeneous nature of signal intensity distribution and the non standard quality of the images acquired. Hence, luminescence thresholds are used available in the 3DSlicer[®] software, and by user intervention it is possible to extract the bifurcation geometry by a DICOM dataset. In Figure 3.14, the segmentation for two cross sections of the abdominal aorta bifurcation is shown. For a better optical result, lines are drawn on the boundaries of the selected areas of the original set.

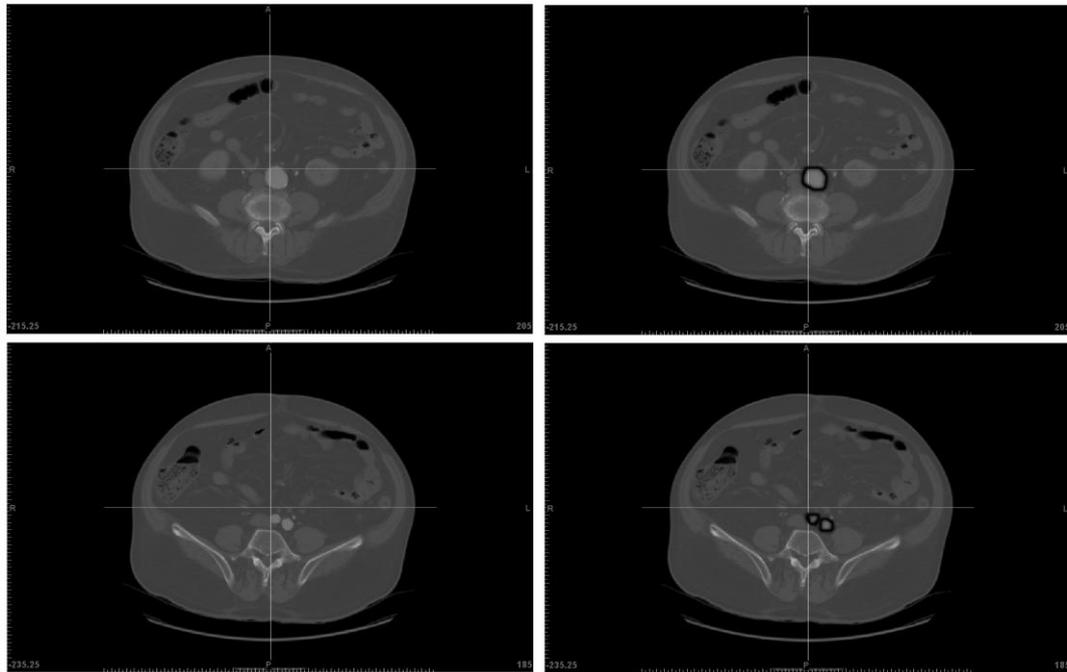


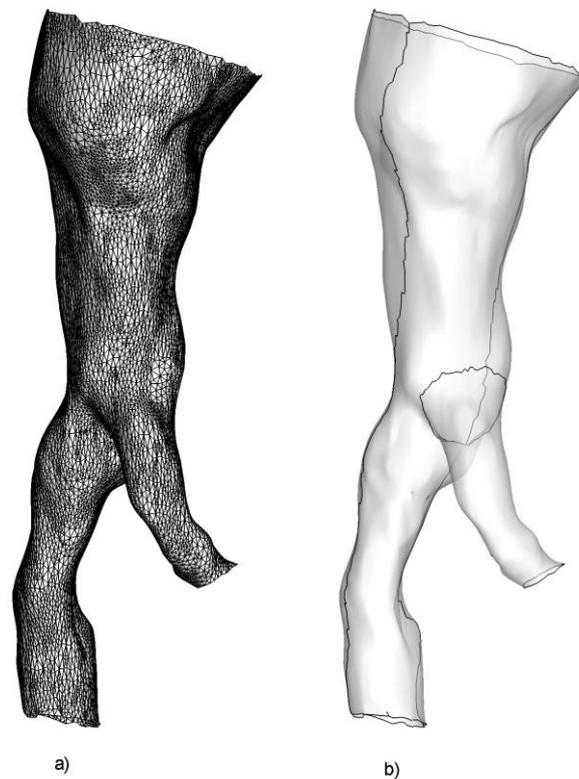
Figure 3.14 : (a) Two typical images of a DICOM data set from medical examination of an abdominal bifurcation case. (b) The same images with the area of interest highlighted.

After the segmentation of the volume of interest (abdominal aorta bifurcation in this case), the 3D Slicer[®] software produces a 3D triangulated surface geometry by combining the data for every two planar images, with the use of an interpolation method for the third dimension. The result of the reconstruction procedure is an STL file, the format of which is native to the stereo-lithography CAD software. The STL file used in this study is visualized in Figure 3.15a with the triangle edges visible.

Geometry preparation - Topological partition

The bifurcation shape created by the 3D Slicer[®] software is a closed manifold. Therefore, the surface was partitioned into two branches and each branch to two open manifolds. This was achieved using the pyFormex open – source software as developed by Ghent University and dedicated to create and handle large geometrical models. By using the pyFormex Graphical User Interface (GUI) the separation of the two branches and the

further separation of each branch resulting in 4 different manifolds are done. These are shown in Figure 3.15b. This separation is an essential stage in the methodology of the overall grid generation technique.



**Figure 3.15: (a) The STL file containing the abdominal bifurcation geometry visualized with triangles
(b) The abdominal bifurcation geometry separated in open manifolds.**

As a consequence of the partition, the main left manifold is formed as a discontinuous manifold with an opening in the position where the branch was formerly united. Due a mathematical limitation within the algorithm as initially is developed, structured grid generation over triangulated surfaces may be applied only on continuous manifolds. This constraint has been eliminated using a handy implemented technique. The original drawback has become a methodological advantage by using the approach which is now described

Multi-block surface structured grid generation

In this section the method for generating a surface structured grid with concurrent grid preparation for one-to-one union of the two branches is presented. The surface grid generation methodology is an extension of the one presented in a former application [Makris et al. 2012a] and produces a grid strongly conforming to the triangulated surface.

The proposed method combine a multi-block structured surface grid generation over triangular surfaces with concurrent topological formation that preconditions a one-to-one block matching in a single framework. This procedure is executed by a set of in house written codes. As a part of the method, a new approach has been

developed for the manipulation of the opening formed on the main branch, shown in Figure 3.16a, due to the partition of the geometrical shape.



Figure 3.16: (a) The left manifold that the branch is united. (b) The same manifold with the hole filled with triangles.

The approach is comprised of the following steps:

- Creation of a triangulated patch over the opening of the 3D shape
- Formation of a planar triangulation in a predefined two dimensional (2D) domain, with a one-to-one correspondence between nodes, edges and faces with the surface 3D triangulation
- Extraction of the curve of the 2D opening in the planar domain
- Generation of a 2D multi-block structured grid on the planar domain with the generation of a single structured block bounded by the opening curve.
- Generation of a 3-D multi-block structured grid over the initial 3D triangulation with concurrent preparation for one to one union of the two branches

The opening on the 3D manifold is closed by triangles by applying an unstructured grid generation technique ,e.g. the Advancing Front Method [Gordon W. N. and Hall C.A. 1973]. The full surface domain is shown in Figure 3.16b. The application of the formalism for the structured grid generation for triangulated surfaces includes the isomorphic transformation of the triangular surface leading to a planar triangulation. The

triangulation shown in Figure 3.17a is the result of applying the methodology to the surface domain of Figure 3.16b.

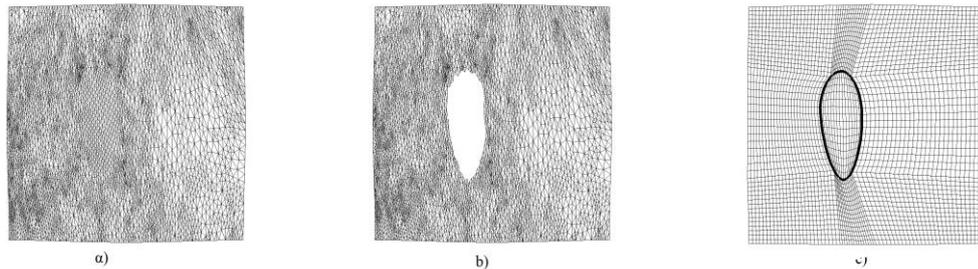


Figure 3.17: (a) The planar triangulation of the “filled” manifold (b) The planar triangulation with the triangles of the hole removed (c) The planar multi-block grid that is created and the extracted boundary curve of the hole

The indexes of the triangles formed inside the opening are known so it is a trivial task to remove them from the planar triangulation. The result of that abstraction leads to the planar triangulation with an opening as shown in Figure 3.17b.

Due to the shape preserving nature of the isomorphic transformation, the bound of the opening on the planar triangulation corresponds to the shape of the opening on the 3D geometry. Based on that fact, the extraction of the boundary curve of the planar opening may be carried out by applying a cubic spline function along the boundary vertices. This extracted curve is shown in Figure 3.17c as a thick line for better optical interpretation and used as a bound for the generation of a multi-block structured planar grid as given in Figure 3.17c. The multi-block structured planar grid is then subjected to the full planar triangulation (as in Figure 3.17a). After the subjecting the barycentric coordinates for each structured grid vertex inside every triangle are calculated. Due to the isomorphic transformation, the barycentric coordinates are unvaried in the 3D surface triangulation. Using that information, along with a back projection, a surface structured grid is obtained, resulting in the surface structured multi-block domain given in Figure 3.18.

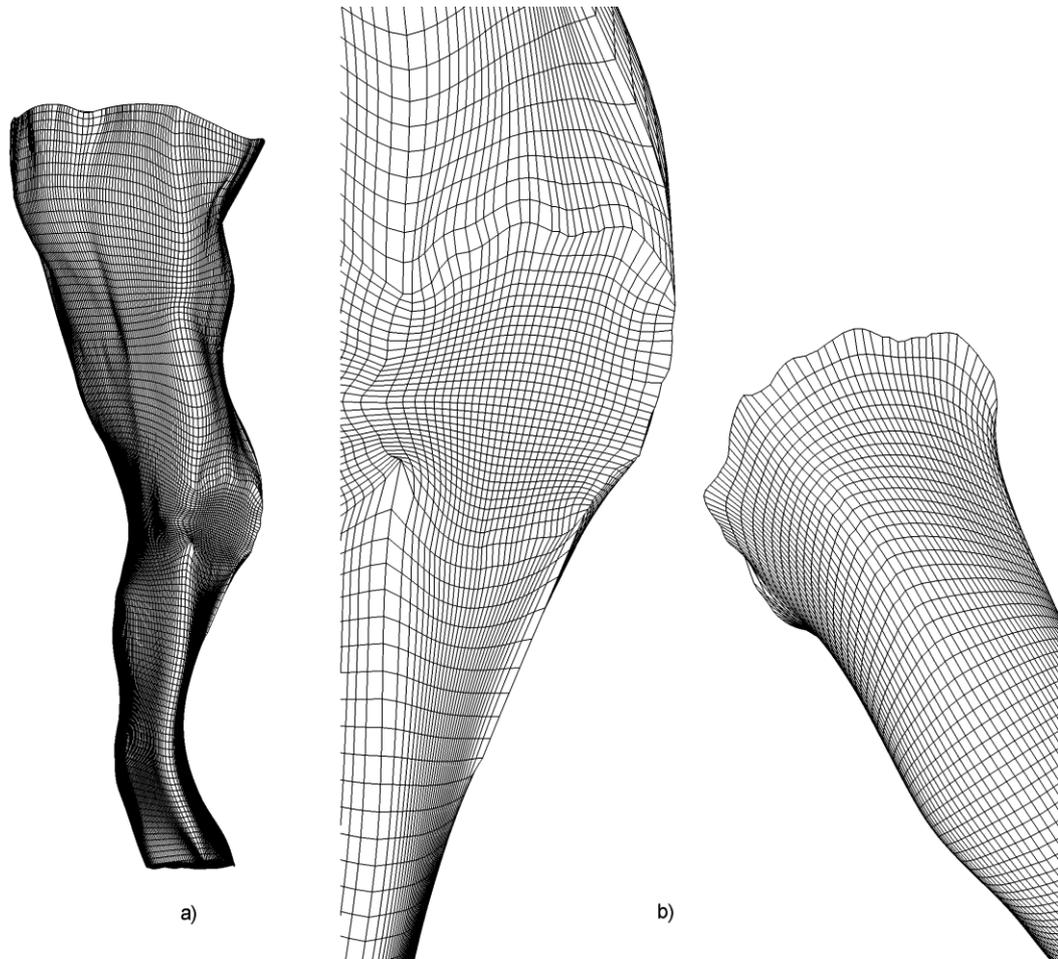


Figure 3.18: (a) The surface structured multi-block domain created (b) the surface structured multi-block domain (c) the second branch created with a one to one matching condition.

The outcome of the procedure is a multi-block structured grid within which a structured block is formed at the place where the initial geometry had an opening. This block is used for a one - to - one matching with the second branch. More details about the mathematical formulation of the creation of an isomorphic parameterization from surface triangulations, about the structured grid mapping and the grid enhancement technique can be found in a previous chapter.

Volume grid generation and refinement

After the surface structured grids are generated on the shells, the unification and creation of an initial 3D grid is carried out using a linear transfinite interpolation (TFI) method. The structured surface grids produced for the left and right main branches due to the one-to-one matching can be interpolated in a single grid block. So the final bifurcation shape consists of 2 elementary blocks, one for each branch.

Due to the topology of the computational domain produced, a number of elements in the corners of the topology appear to be skewed with equangle skewness equal to 0.9. This feature is also apparent in the grid quality study which is the next process to be performed on the generated grid. The above disadvantage, due to the simple topology selected, is allayed by using a Sorenson algorithm [Sorenson, R. L. and Steger, J. L. 1980]

in the grid enhancement routine. This algorithm enables the distance of the first element vertex from the bounds to be controlled and by applying it to the computational domain produced, the irrational shape of the elements in the topology corners is avoided.

The system of Partial Differential Equations (PDE) used in the elliptic grid generation code is treated using the non-commercial solver MUMPS [Amestoy et al. 2001; 2006]. MUMPS is a direct solver using the multi frontal method and it utilizes the MPI protocol to run in parallel mode on a computer cluster to reduce the computational time.

The multi-block structured grid that has been created can be exported as a simple “multi-block” formatted as for Plot3D and Tecplot® data. An additional ability of the set of in-house codes developed for the method is the export of the structured grid as a CFD general notation system (CGNS). CGNS is a general, portable, and extensible standard for the storage and retrieval of CFD data originally developed by the American Institute of Aeronautics and Astronautics. Its data format is compatible with many CFD solvers both commercial (Ansys CFX®, Ansys Fluent® etc.) and open source (OpenFOAM® etc.).

3.2.2 Simulation of the flow field inside a patient specific iliac bifurcation

In this section a description of the grid convergence study, performed in order to validate the grid independence of the flow field solution, is given along with a brief solver comparison. Furthermore, an evaluation of the quality of the grid produced using our methodology, by comparing it with three unstructured grids produced by the Ansys ICEM CFD® grid generator is carried out.

Grid independence and Grid quality study

In order to obtain results independent of grid resolution, a grid convergence study is performed. For this purpose four structured grids are generated following a graduate refinement, ranging from 174,725 to 571,687 elements. Detailed information is given in the Table 3.4.

Name	Number of elements
S1	174.725
S2	230.796
S3	334.986
S4	571.687

Table 3.4: Number of hexahedral elements for the 3D multi – block structured grids generated by the methodology

For the grid independence study a CFD in-house finite volume code based on the pressure correction method SIMPLE [Patankar S. 1980] is used. The aforementioned in-house code has already been used in various bioflow studies [Neofytou P. et al. 2006;2008]. There are two main reasons for this: (i) to underline the strengths of the current method by applying it not only to a commercial CFD package (such as Ansys CFX®) but also to

a code that is more sensitive – in terms of convergence - to grid quality and (ii) to develop the in-house CFD code further, in conjunction with the grid generator, as the methodology is meant to be part of a broader effort towards an integrated patient specific approach. Furthermore the results of the grid independence study were used for a brief comparison between the in-house code and the commercial Ansys CFX® software.

For each of the grids a steady state flow simulation is performed, representing a typical case of blood flow in the abdominal aorta with a Reynolds number of 1200. In order to make a quantitative comparison of the flow fields predicted by the different grids, the calculation of the root mean square (RMS) of the relative error of the velocity magnitude is made, as given by Eq. (3.10). In this equation ε_i is the relative error at selected geometrical points given by Eq. (3.11). Eq. (3.10) is used successively to compare between the grids of different resolution.

$$\varepsilon_{rms} = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^{100} \varepsilon_i^2}{100} \right)}, \quad (3.10)$$

$$\varepsilon_i = \left| \frac{u_{i,coarse} - u_{i,fine}}{u_{i,fine}} \right|, \quad (3.11)$$

Specifically, 100 geometrical points are selected along a centreline which can be considered as the axis of the branch. Following an ascending order with respect to grid resolution for the grids S1 to S4, Eqs. (3.10) and (3.11) are applied for the same geometrical points and the numerical assessment of grid independence is based on the RMS values.

The RMS values for the four grids are given in Table 3.5, while the more detailed velocity magnitudes calculated at the 100 geometrical points, are presented in Figure 3.19.

Grid sizes (X 10 ³)	Erms(%)
174-230	1.45
230-335	1.39
335-572	1.17

Table 3.5. Root mean square of the relative error for the four structured grids generated by the methodology

Results suggest that grid S3 would be the best choice of computational domain, combining independency of the flow field solution at sufficient level with acceptable computational speed and memory use. The empirical criterion we set for this study was to require the RMS to be lower than 1.2%.

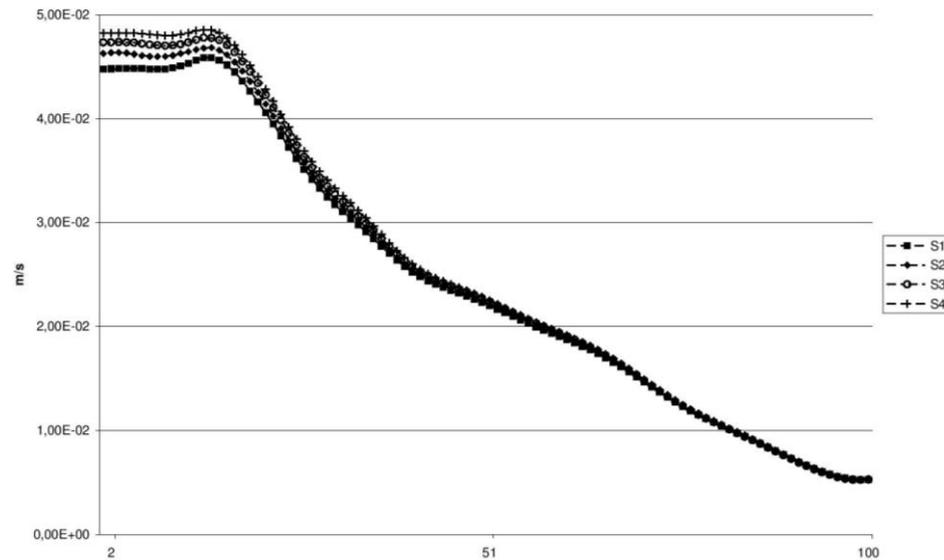


Figure 3.19: A comparison a) – d) of velocity magnitude for a defined of 100 points fit for the four structured computational domains

In order to evaluate the validity of the CFD simulation a brief solver comparison is carried out. The typical case of blood flow in the abdominal aorta used before was simulated by both the in-house code and a commercial CFD code (Ansys CFX®), employing the selected S3 grid. The simulation was carried out twice with the commercial code using different discretization schemes for the advection terms; a) a 1st order upwind scheme ,b) the Ansys CFX® high resolution scheme. When the Ansys CFX® High Resolution scheme is used, the second order correction is calculated based on the upwind gradient and is therefore a second order upwind scheme. The diffusion terms are calculated based on element shape functions and are thus second order accurate and pressure is further corrected by applying a fourth order pressure correction term to prevent pressure-velocity decoupling .

For the solver comparison 100 geometrical points are selected. Eq.(3.10) is used to calculate \mathcal{E}_{rms} whereas in this computational case the relative error \mathcal{E}_i expressing the solver differences is calculated according to Eq. (3.12)

$$\mathcal{E}_i = \left| \frac{u_{i,solver1} - u_{i,solver2}}{u_{i,solver2}} \right|, \quad (3.12)$$

To make quantitative comparison between the solvers, three flow fields (one from the in-house code and two from the commercial Ansys CFX® using different advection terms discretization schemes) are depicted in Figure 3.20, in the same way as Figure 3.19.

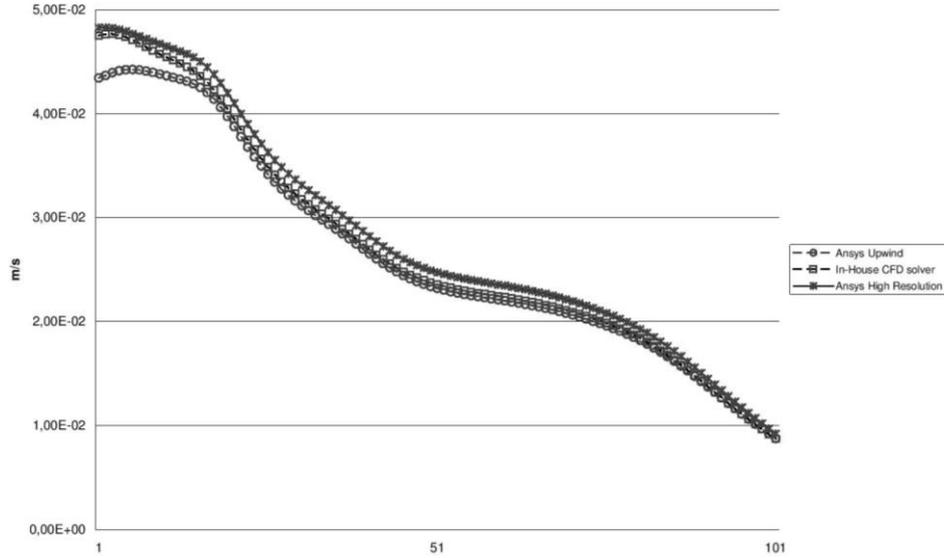


Figure 3.20: A comparison of Ansys CFX solver (using two different advection discretization schemes) versus in-house Finite Volume solver. Visualization of the velocity magnitude for 100 points fit the S3 structured computational domain

The ε_{rms} for the comparison between Ansys using the 1st order upwind scheme and the in-house code is calculated equal to 4.3 % while the erms between Ansys using the high resolution scheme and the in-house code is calculated equal to 2.6%.

In order to assess the quality of the grid and the geometric accuracy, first the grid skewness metric (SKM) and then the signed distance between the outer surface of the structured grid and the segmented STL surface were calculated.

For the geometrical accuracy of the method the signed distance between the grids surface and the STL surface is measured. The measurement of the distance from the triangulated surface was based on the method that is presented in technical reports [Baerentzen J.A. and Aanaes H. 2002, Jones W.M 1995]. For every structured grid node the orthogonal projection to the closest triangle element is calculated. Having obtained the structured node projection on the triangular surface, the distance of that point and the original structured grid node to the Cartesian origin point is calculated and the differences are presented as a percentage. The results show that the geometry is represented with high accuracy and the mean distance between the two surfaces calculated for all the structured grid surface vertices is 0.06% with maximum value equal to 0.78%.

For the grid quality assessment the skewness metric for hexahedral elements is defined by Eq. (3.13) and is calculated for every structured grid element.

$$SKM = \max\left(\frac{\theta_{\max} - 90}{90}, \frac{90 - \theta_{\min}}{90}\right), \quad (3.13)$$

$$SKM = \max\left(\frac{\theta_{\max} - 60}{120}, \frac{60 - \theta_{\min}}{60}\right), \quad (3.14)$$

In Eq.(3.13), θ_{\max} and θ_{\min} are the maximum and the minimum angles respectively for each hexahedron element. Values range from 0.0 representing a perfect equiangular element to 1.0 for an absolute skewed element.

Results of the SKM metric are presented in Table 3.6. They are divided into four groups depending on the number of elements and the overall percentage belonging to each group. The groups are classified from excellent to poor. Both the grouping and classification are based on empirical rules.

The selected S3 grid is a high quality grid. The majority of its elements are in the “excellent” quality class and only a few elements are classified as “poor”. These “poor” quality elements arise from the grid generation topology as explained previously.

Finally, while further grid enhancement through using a more complex grid topology might provide higher quality grids, it would make the application of the method to multiple branching geometries a highly demanding task. The establishment of the most efficient grid topology for a given patient specific mesh generation framework is the objective of future work.

3.2.3 Comparison of current methodology with commercial unstructured grid approach.

In order to evaluate the quality of the proposed methodology the results of the CFD simulations inside the bifurcation are compared against those obtained via other meshing techniques. In particular the S3 structured grid generated by the proposed methodology and three unstructured grids generated by the commercial software Ansys ICFM CFD® are used. The three unstructured grids were generated using the advancing front method and consisted of 335,986 to 2,137,266 thousand tetrahedral elements and named U1, U2 and U3. It is reminded that the structured grid S3, was composed of 334,986 hexahedral elements and is selected as the optimal grid resolution for our case study. The detailed data for the computational domains, used in the comparison, are presented in Table 3.6. In order to estimate the quality of the compared grids, calculations were made of the grid skewness metric (SKM) for both the structured and the unstructured grids. For the tetrahedral unstructured grid the SKM metric is calculated by Eq. (3.14). Results of the SKM metric for the computational domains are presented in Table 3.6. Both the grouping and classification are common for both kinds of grids.

SKM	S3	U1	U2	U3
	Number of Elements - Percentage (%)			
0.0 – 0.25 (Excellent)	169104 – 50.48	42196 – 12.56	107682 – 12.78	321767 – 15.05
0.25 – 0.50 (Good)	148512 – 44.33	258376 – 76.92	649410 – 77.07	1622952 – 75.93
0.50 – 0.75 (Medium)	16691 – 4.98	35306 – 10.51	85452 – 10.14	192463 – 9.00
0.75 – 1.00	679 - 0.20	19 – 0.005	33 – 0.004	84 – 0.004

(Poor)	(max 0.91)	(max 0.87)	(max 0.86)	(max 0.89)
Sum	334986 - 100	335897	842577	2137266

Table 3.6. Skewness metric (SKM) for the compared computational domains

Name	Number of elements	Grid Type
U1	335897	Tetrahedral Unstructured
U2	842577	Tetrahedral Unstructured
U3	2137266	Tetrahedral Unstructured
S3	334986	Hexahedral Structured

Table 3.7: The Number of elements and the grid type of the computational domains used in the comparison.

The computational domains used for the comparison are shown in Figure 3.21. Figure 3.21 a), b) and c) respectively depict multi-block structured grid S3, unstructured grid U2 and unstructured grid U3 generated using Ansys ICEM CFD®.



Figure 3.21: A view of three grids used for the comparison. (a) The structured grid S3 (b) The “coarse” unstructured grid U1. (c) The “fine” unstructured grid U3.

The flow field is obtained using Ansys CFX® in all cases. The simulation comparison represents a typical case of blood flow in the human abdominal aorta. In order to conform with the *in vivo* measurements a uniform inlet velocity profile is imposed, with Reynolds number of 1200; also a uniform pressure field with equal values

at both branch outlets is imposed. The blood was assumed to be an incompressible, homogenous, Newtonian fluid, with density equal to 1056 kg/m^3 and dynamic viscosity equal to $3.1 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$. The convergence criterion was set as an Root Mean Square (RMS) equal to 5×10^{-6} .

In order to make a comprehensive evaluation, both visual and quantitative comparisons were made out. Figure 3.22 a) to c) gives a coronal planar contour for the three computational domains S3, U1 and U3 respectively. A visual comparison of the contour colors reveals the fact that the unstructured grids underestimate the velocities, the effect being more pronounced for the “coarse” unstructured grid U1.

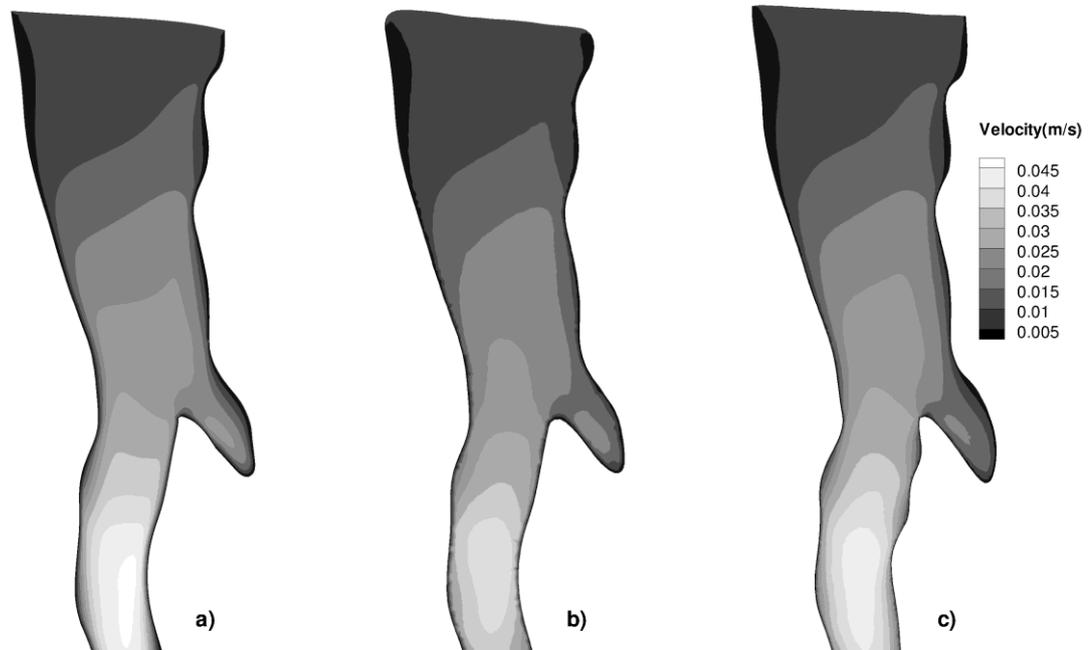


Figure 3.22: A visualization of a coronal planar contour of the velocity magnitudes presented for three computational domains. (a) The structured grid S3 (b)The “coarse” unstructured grid U1. (c) The “fine” unstructured grid U3.

A similar comparison for an axial planar section, in the area near the branch, is depicted in Figure 3.23. Again, Figure 3.23 a), b) and c) correspond to structured grid S3 and unstructured grids U1 and U3, respectively.

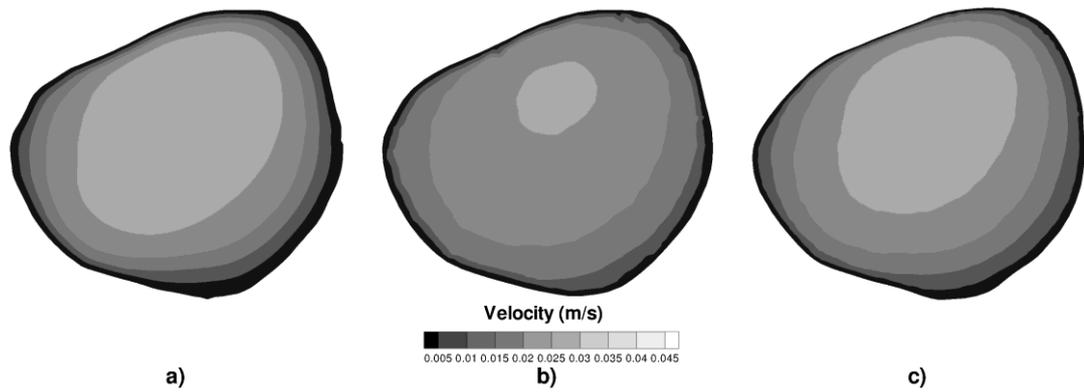


Figure 3.23: A visualization comparison for an axial plane contour of the velocity magnitude in the area near the branch, presented for three computational domains. (a) The structured grid S3 (b) The “coarse” unstructured grid U1. (c) The “fine” unstructured grid U3.

The comparison suggests that the structured grid provided smoother flow fields. The presence of curly contour boundaries in the unstructured “coarse” grid U1 contour indicates high numerical skewness. The effect is fade out and almost invisible for the “fine” unstructured grid U3. However, the structured grid S3 provided a smooth velocity magnitude transition while using only almost a quarter of the “fine” unstructured grid U3 elements.

To make quantitative comparison between different grids, the velocity magnitudes are depicted in Figure 3.24 for 100 geometrical points inside the computational domain, in the same way as Figure 3.20.

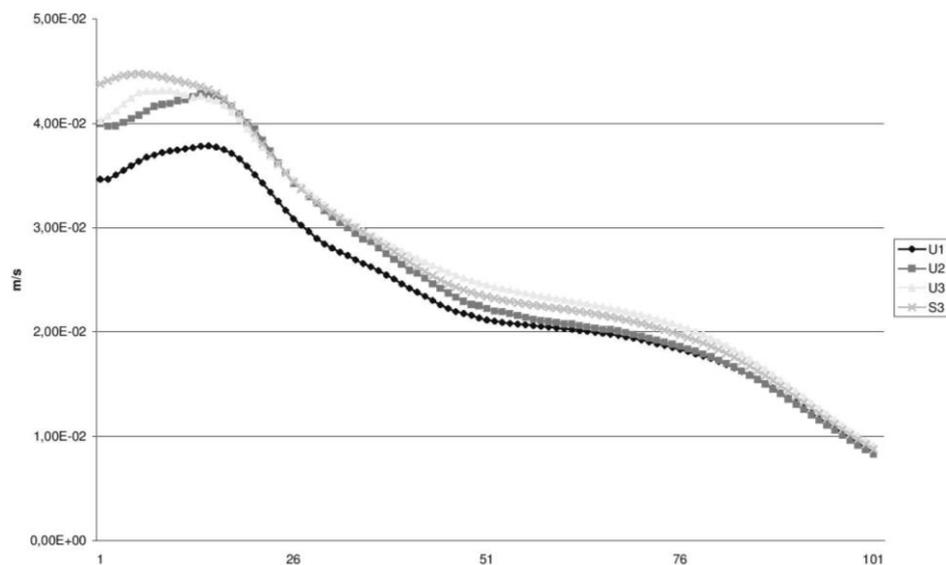


Figure 3.24: Comparison of velocity magnitudes defined at 100 points for the structured grid c) S3 and unstructured grids a) U1, b) U2 and c) U3.

It should be noted that the geometrical points are those originally used for the solver comparison. In fact, Figure 3.24 gives quantitative data for unstructured grid U1 as well as for U2 and U3. It is shown that with the

unstructured grids lower velocity magnitudes are calculated, which may be a consequence of poor alignment between the primary velocity vector and the tetrahedral elements of the grids.

In particular, use of the unstructured grid U1 leads to velocity magnitude underestimation of 10.23% ϵ_{rms} and high numerical skewness, even though it has almost the same elements resolution as structured grid S3. A grid refinement of the unstructured grid by a factor of 2.5 (U2, 842,577 elements) resulted in less obvious signs of numerical skewness and gave an ϵ_{rms} equal to 5.03%, i.e. the solution was closer to the one obtained using the structured grid S3. Further refinement of the unstructured domain to the U3 grid resolution (2,137,266 elements) resulted in an ϵ_{rms} equal to 3.68% with respect to S3. It should be noticed that the relative error RMS of Structured grid S1 compared with structured grid S3 is calculated to be 2.8%. Based on this parameter the behavior of the “fine” Unstructured grid U3 is almost equivalent to the “coarse” Structured grid S1.

The differences reported here and the visualization of the flow fields obtained by the different computational grids confirm the conclusions reached in previous comparison studies [Longest, P. W. and Vinchurkar S. 2007; Vinchurkar S. and Longest P. W. 2008; De Santis G. et al. 2010], namely that the structured grid is capable of providing a more accurate flow field solutions than an unstructured grid of similar grid resolution.

3.2.4. Conclusions

The computational study of branching biological systems is a field which has grown interest over the last decade due to the presence of similar shapes in many human body organs. As a result the modelling of bifurcation geometry has become an important task.

Many previous studies reconstructed the computational domain of a bifurcation by using an unstructured computational domain, compromised by the accompanying limitations. A series of studies have showed that for bifurcation geometry the use of a structured grid is far more efficient and produces flow simulations with low numerical skewness and fast convergence.

Other researchers have focused on the vessels centerlines and applied of a grid sweep method or the deformation of template grids to match calculated NURBS functions. While these methodologies produce structured grids of high quality suitable for the study of flow in a bifurcation, they have the disadvantages of the approximate reconstruction of the shape generated by the medical imaging data. This drawback has been confirmed in a recent bifurcation study that used structured grid, and it concluded that the next step in structured grid generation of branching shapes is the generation of a structured multi-block grid on a domain described by a surface triangulation (STL type and similar) [De Santis et al. 2010]. Recently, few studies have addressed the problem of hexahedral mesh generation from STL-type surface [De Santis et al. 2011a);2011b), Trachet B. et al. 2011, Gallo et al. 2011].

In the present study an effective technique has been developed for detailed shape reconstruction and multi-block structure grid generation of patient-specific bifurcation geometry. Starting from data obtained for an abdominal aorta bifurcation by a medical imaging examination in DICOM format, a surface triangulation is formed in an STL format. Then a high quality multi-block structured grid is generated that conforms to the surface. The application of this methodology is combined with grid quality convergence and quality study. Also

a comparison study has been undertaken that underlines the superiority of the structured grid produced by the methodology over unstructured tetrahedral meshes produced by commercial meshing software.

The use of a ‘one block per branch’ topology, suggested by this study, has the advantage of topological simplicity. It also provides the ability to create multiple branching geometries without the structured grid resolution limitations of former topologies, such as the butterfly topology. The cost of our topological simplicity is only the production of computational domains that contain a few skewed elements in the block corners.

As a future objective, different topologies for grid generation will be studied to obtain in the highest quality grid with the use of the fewest elements possible. Finally, another future task is the application of the method to grid generation for the aortic arch, including a series of bifurcations together with the use of the model for blood flow simulations. The multi block structured grid of the aortic arch with a one block per branch topology is depicted in Fig 3.25.

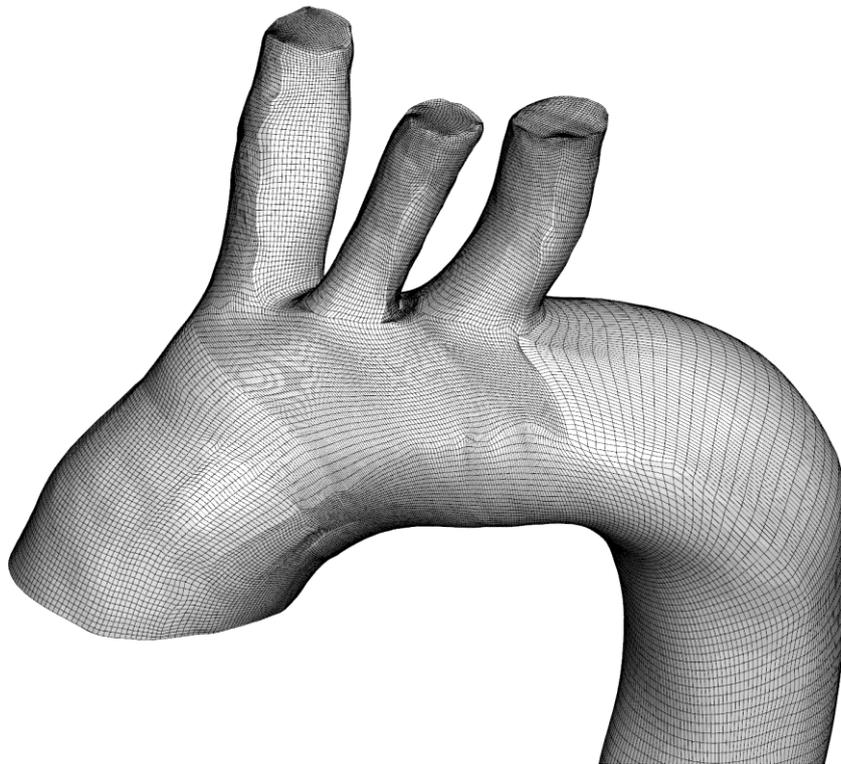


Fig 3.25: The structured multi-block grid of the aortic arch produced by the methodology.

Overall, the proposed methodology is able to create high quality multi-block structured grids that may be used for the computational study of branching biological systems. This novel approach perfectly fulfils the two basic criteria, namely the type of the computational grid used and the geometrical accuracy, so enabling the generation of a high quality structured grid that conforms to a detailed surface description (triangulation) derived from medical imaging data. The methodology presented in this study is intended to be a step towards the development of an advanced integrated model incorporating CFD modelling to provide an accurate, patient specific framework for medical diagnosis and prognosis

3.3 Particle transport and deposition under high frequency Oscillatory ventilation and Normal Breathing

The fluid mechanics of High Frequency Oscillatory Ventilation (HFOV) for gas transport in the pulmonary region of the human lungs have been thoroughly studied by different methods. The major concept of HFOV adaptation is that it will push gas into further generation of the bronchial tree, with adequate gas mixing and small tidal volume. However particle transport and deposition under HFOV is a rarely studied case where different mechanisms, compared to the mechanisms of gas transport, may associate. The target of this application study is to numerically compare the efficiency of aerosol deposition under HFOV to Normal Breathing (NB) and to further clarify the mechanisms of particle transport and deposition under oscillating flows.

The fully Eulerian Computational Fluid Particles Dynamic (CFPD) model described in the Theory section is used for studying the transport and deposition of several sizes of inertia particles, under different transient flow conditions, inside a single physiologically realistic bifurcation created by generations G3 – G4 of the human lung.

An insight into the particle dynamics under high frequency oscillating flow fields is given and the results showed that the highly oscillating field HFOV displayed stronger secondary flows, thinner boundary layers and strong counter flow that accumulate and deposit particles further than a lower frequency oscillatory field NB.

3.3.1 Air flow under high frequency oscillatory flow fields

High Frequency Oscillatory Ventilation (HFOV) is a technique of mechanical ventilation assisting or replacing spontaneous breathing, with major application the adequate ventilation of neonates. HFOV is characterized by high oscillation frequency (5 – 50 Hz), small tidal volumes and in contrast with other mechanical ventilation techniques uses reciprocating pumps or diaphragms in order to produce mechanically active inhalation and exhalation phases.

HFOV is commonly used for therapy of pulmonary diseases such as acute lung injury (ALI) and acute respiratory distress syndrome (ARDS) in adults and air leaks, such as pulmonary interstitial emphysema (PIE) and Bronchiolo-Alveolar injury in neonates [Clark et al. 1986; Derdak et al. 2002; The Acute Respiratory Distress Syndrome Network.2000].

The mechanics of HFOV for gas transport in the pulmonary region of the human lungs have been studied experimentally, numerically and in theoretical basis in order to clarify its physiology. The major concept of HFOV is the increase of diffusion and the enhancement of the longitudinal gas transport through a forced diffusion mechanism that conclude to push gas into further generation of the bronchial tree, with adequate gas mixing and small tidal volume at the same time.

Lunkenheimer et al. [1972] introduced HFOV as an improved version of other high frequency ventilation methods. Theoretical [Watson EJ 1983] and experimental findings [Joshi et al. 1983] proved that in oscillatory forced flows the longitudinal flux of a gas is augmented by the increase of the oscillation frequency. Fredberg et al. [1987] assessed factors influencing the mechanical performance of high frequency ventilators under controlled conditions and noted that the dominant mechanisms of gas transport during HFOV are longitudinal

(or Taylor) dispersion and molecular diffusion. Krishnan and Brower developed a review study [2010] and concluded that HFOV treatment is superior than conventional mechanical ventilation (CV) and should be considered promising as an experimental mode of ventilation for the treatment of plenty lung diseases. Heraty et al. [2008] experimentally investigated the flow field during HFOV using particle image velocimetry on realistic and idealized bifurcation cast models in order to understand localized fluid dynamics mechanisms and concluded that the increase of oscillation frequency will increase the duration of the reverse flow near the walls (counter flow effect). The same study also highlighted the importance secondary flows and recirculation in the HFOV flow field.

Hirahara et al. [2011] performed a parametric numerical study of the HFOV driven flow in a geometrically symmetric dichotomous respiratory channel and provided comprehensive information for the gas flow, specifically noting the longitudinal gas redistribution characterized by the incoming central flow and the outgoing near wall flow. Zhang et al. [2002] performed a computational study for the air and particle flow under normal breathing and high frequency oscillatory ventilation conditions inside a sequentially branching lung model. This study provided detailed description for the flow and particle transport mechanisms under normal breathing conditions and plenty information for the fluid flow under HFOV. However no information about particle transfer under HFOV was presented. Choi et al. [2010] studied high frequency oscillatory flow under consecutively more complex geometries (straight tube, single bifurcation tube model and computed tomography based human airway model) using CFD methods and concluded that counter flow phenomenon enhances gas mixing in combination with geometrical complexity.

Scholz A.W. et al. [2011] developed a comparative simulation combining Magnetic Resonance Imaging with contrast gases with Computational Fluid Dynamics (CFD) in order to further clarify the mechanisms of gas transport during HFOV and concluded that experimental investigations through the use of MRI with the combination of CFD models may provide us with a clear idea of the gas transport mechanism.

3.3.2 Particle transport and deposition under high frequency oscillatory fields

Pulmonary delivery of inhaled aerosol drugs under HFOV is a highly interesting subject. However aerosol deposition assessment under HFOV is a rarely studied case due to the difficulty of in – vivo measurements and ethical concerns in conducting studies in neonates [Sood et al. 2010]. Nevertheless some experimental studies, available at the literature, examine the ability of drug delivery during HFOV.

Sood et al. [2010] studied pulmonary aerosol delivery during HFOV in neonatal pigs with a simplified method that can not provide details for the deposition or transport mechanisms of the particles. Briant and Lippmann [1992] measured the particle transport through a cast, representing a part of the lung, during HFOV. Different carrier gases and different oscillating frequencies were used and the conclusion was that particle transport was faster in gases of higher kinematic viscosity and particle deposition is expected to increase with the oscillating frequency at high frequency situations (>2 Hz). Garner et al. [2000] examined albuterol transfer by metered-dose inhaler in a high-frequency oscillatory ventilation model and concluded that albuterol transfer under that model would be problematic due to the high particle deposition on the endotracheal tube of the setup. Alzahrani [2010] compared albuterol delivery under HFOV, and CV by using an experimental setup with a

pressurized meter dose inhaler (pMDI) and an adult cast lung model with different compliance levels. The conclusion was that albuterol deposition was significant higher under HFOV.

Motivation for the development of our study is the fact that different mechanisms take part in particle transport and deposition, during HFOV, compared to the mechanisms of gas transport. The enhancement of the longitudinal gas transport through a forced diffusion mechanism that pushes gases into further generation of the bronchial tree may not function similar when it comes to particles. Particle inertia and wall deposition enforced by secondary flows and counter flow may play a considerable role that may lead to different results.

The current study is a computational simulation of transport and deposition of inertial particles, under HFOV and normal breathing (NB) conditions, inside a physiologically realistic bifurcation, modelling the third and fourth lung generation (G3 – G4). The computational simulation is a fully Eulerian approach, for both air and particle phases. The Eulerian approach offers significant advantages over the frequently chosen Lagrangian approach [Pilou et al. 2011]. Initially, it may be used for small particle diameters where the Lagrangian approach becomes highly demanding in terms of numerical implementation due to the stochastic method utilized in order to calculate particle diffusion. Furthermore the Eulerian model is more efficient compared to Lagrangian models as it can take into account simultaneous diffusive and inertial particle transport. The advantages of the Eulerian approach combined with a particle transport analysis that incorporates particle inertia and diffusion at the same time provided us with a powerful Computational Fluid Particles Dynamic (CFPD) model that can give insight into the particle dynamics under high frequency oscillating flows.

Therefore the overall target of this study is to numerically compare the efficiency of aerosol drug deposition under HFOV to NB and to further clarify the mechanisms of particle transport and deposition under oscillating flows.

3.3.3 Geometry and Grid of a Physiologically Realistic Bifurcation (PRB)

The geometry of the study is a physiologically realistic bifurcation based on the geometrical characteristics of the bifurcation created by the third and fourth lung generation (G3 – G4) according to Weibel's model [Weibel 1963]. These generations are selected due to the peak particle deposition in this region that previous experimental studies have recorded [Schlesinger et al. 1977]. Additionally the simulation of aerosol flow inside bifurcations is of significant interest because the geometry resembles the basic geometrical element of the branching airway of the lung, thus that geometry has been repeatedly used in literature [Asgharian B. and Anjilvel S. [1994]; Kim et al. [1994]; Comer et al. [2001a]].

The computational domain of the study is created by the proposed in-house structured grid generation code [Makris et al. 2012]. In Figure 3.25 the computational domain of the study is visualized. The computational domain is a multi-block high quality structured grid with the adoption of the “butterfly” topology.

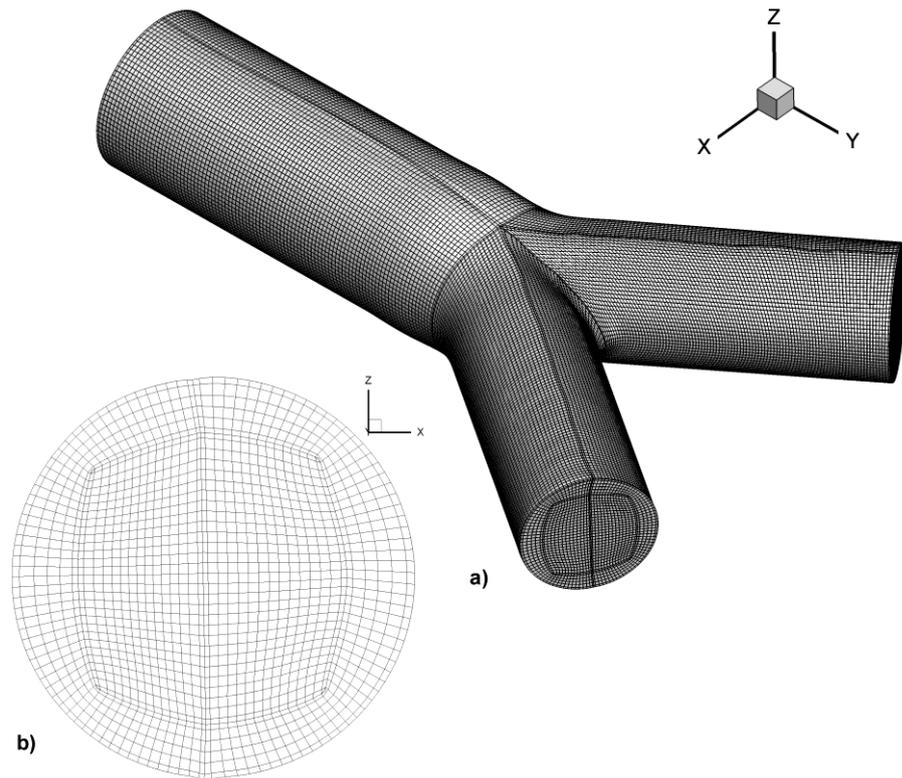


Figure 3.25: The computational domain of the study. a) A multi-block structured grid with the adoption of the “butterfly” topology representing G3 – G4 bifurcation of the human lung, b) an illustration of the internal grid.

3.3.4 Simulation of Particle Transport and Deposition under High Frequency Oscillatory Ventilation and Normal Breathing.

A validated and computationally efficient fully Eulerian (fluid and particles) model that is previously used in other CFPD simulations was further developed in order to provide a better understanding of the particle transport and deposition mechanisms under highly oscillatory flow fields. The numerical simulation of the air flow field is carried out by the commercial software Ansys CFX®. The aerosol particle dynamics simulation is carried out using an in-house particle dynamics code, based on an Eulerian description of the particles General Dynamic Equation. Due to the small size of the particles, the influence of the particulate phase on the air flow field is considered negligible (one-way coupling).

The particles are jetted continuously during the HFOV and NB operation and the particle concentration and deposition, is calculated during several time periods and in total. The numerical experiment simulated 12 seconds of real time. Nevertheless, due to the time symmetry achieved after the first 4 periods the results may be extrapolated to a longer period. The aerosol particles are assumed to be spherical with diameter ranging from 1nm to 10 μ m.

A series of tests was done in order to evaluate the validity of the simulations performed and achieve grid independent results. A time step that represent the peak inhalation phase for the HFOV case with Reynolds

3.3 Particle transport and deposition under high frequency Oscillatory ventilation and Normal Breathing 101

number equal to 1250 was used as a test case. The computations were carried out for three consecutively finer meshes consisting of 466200, 665496 and 1087506 hexahedral elements, entitled GI, GII and GIII respectively.

In order to quantify the difference of the flow fields predicted by the different grids, a calculation of the root mean square \mathcal{E}_{rms} of the relative error \mathcal{E} of the velocity magnitude at 70 geometrical points inside the flow field is made. The relative error for the velocity magnitude is calculated by Eq.(3.10) while the root mean square of the relative error is calculated by Eq.(3.11)

The velocity magnitude is calculated for the three meshes and the differences in terms of \mathcal{E}_{rms} between GI and GII and between GII and GIII are summarized in Table 3.8.

Compared grids	\mathcal{E}_{rms}
GI vs GII	1.15 %
GI vs GIII	0.61%

Table 3.8: Relative square error comparison for three consecutively finer computational domains

Due to the high quality of the hexahedral computational domain with the butterfly topology that ensures element alignment with the predominant flow and sufficient grid clustering near the wall all the computational domains present negligible differences. The calculated values of \mathcal{E}_{rms} are 1.15% between GI and GII and 0.61% between GII and GIII. These results suggest that all the computational domains are of an excellent quality and produce grid independent flow fields. Therefore GI would be the better choice, combining flow field solution independency at sufficient level with good computational speed.

NB - HFOV

As an inlet boundary condition we imposed a sinusoidal velocity waveform at the entrance of the G3 – G4 region for both cases. A frequency equal to 0.25 Hz is imposed as the Normal Breathing waveform and a waveform with frequency equal to 16 Hz for the HFOV case. The boundary condition for the fluid velocity on the wall is a no-slip condition. The two cases produced the same Peak Reynolds Number defined from the maximum inlet velocity at the peak inhalation time phase. The Reynolds number is calculated by Eq. (3.15),

$$\text{Re} = \frac{U_0 D}{\nu}, \quad (3.15)$$

where U_0 is the peak inhalation velocity, D the tube diameter and ν the kinematic viscosity of the fluid.

The two cases produced different tidal volumes; the tidal volume V_T is calculated by Eq.(3.16),

$$V_T = \int_0^{T/2} U_o \sin(2\pi f) A dt = \frac{U_o A}{\pi f}, \quad (3.16)$$

where A is the inlet area and f is the inlet frequency.

For the NB case a tidal volume equal to 0.10075 l is produced and for the HFOV a tidal volume equal to 0.00157422 l is produced. The Womersley number is a widely used dimensionless expression of the unsteady inertial forces in relation to viscous forces defined by Eq. (3.17),

$$a = R \cdot \sqrt{\frac{\omega}{\nu}}, \quad (3.17)$$

where R is the radius of the tube and ω is the angular frequency of the flow. In Table 3.9 a summary of the fluid flow characteristics for both cases is illustrated. The difference in the tidal volume is consistent with the experimental findings of Fredberg et al. [1987] who concluded that tidal volume decreases with frequency.

Case	Period T(s)	Frequency f (Hz)	Peak Reynolds number	Tidal Volume (l)	Womersley Number
NB	4	0.25	1250	0.10075	0.886227
HFOV	0.0625	16	1250	0.00157422	7.08982

Table 3.9: Summary of flow characteristics for HFOV and NB cases.

Particles

In the developed particle dynamics model the dispersed phase is simulated as a monodisperse particle population with density considerably higher than the fluid. In order to have an insight of the particle deposition mechanisms and evaluate the use of HFOV for targeted drug delivery, comparison for 6 different particle sizes has been carried out. The particles are assumed spherical with diameter equal to 1nm, 50 nm, 100 nm, 900 nm, 5 μm and 10 μm respectively. The transport and deposition for all the particle diameters has been studied for both HFOV and NB conditions. In Table 3.10 the particle diameter and the corresponding Stokes number is presented.

Particle Size	Stokes number
1nm	7.1533×10^{-7}
50nm	4.0785×10^{-5}
100nm	9.3226×10^{-5}
900nm	3.0116×10^{-3}
5 μm	8.1702×10^{-2}
10 μm	3.2188×10^{-1}

Table 3.10: Spherical Particle diameters and Stokes number

At the inlet of the bifurcation a constant uniform (plug) concentration particle profile, for the whole time of the numerical simulation, is assumed. The boundary condition for the particle concentration on the wall is the

condition of totally absorbing wall. Therefore once a particle hit the wall, it is assumed to deposit on it without being able to re-enter the flow field.

Fluid results

The HFOV velocity profiles significantly differ from the profiles of the NB case. During HFOV the core flow is less influenced by the boundary layers and exhibits strong phase lags in the flow reversion. On the other hand in the NB case the core flow approximately follows the pressure gradients.

In the HFOV case strong counter flow (inspiratory and expiratory fluid streams coexistence) is present near the walls while in the NB case almost no counter flow is present. In Figure 3.26 the dominant velocity magnitude is illustrated in a colour contour for the HFOV case for four different time phases of the flow (a)inhalation start, b) inhalation peak, c)flow reversal, d)exhalation peak), while in Figure 3.27 the respective time phases for the NB case are illustrated.

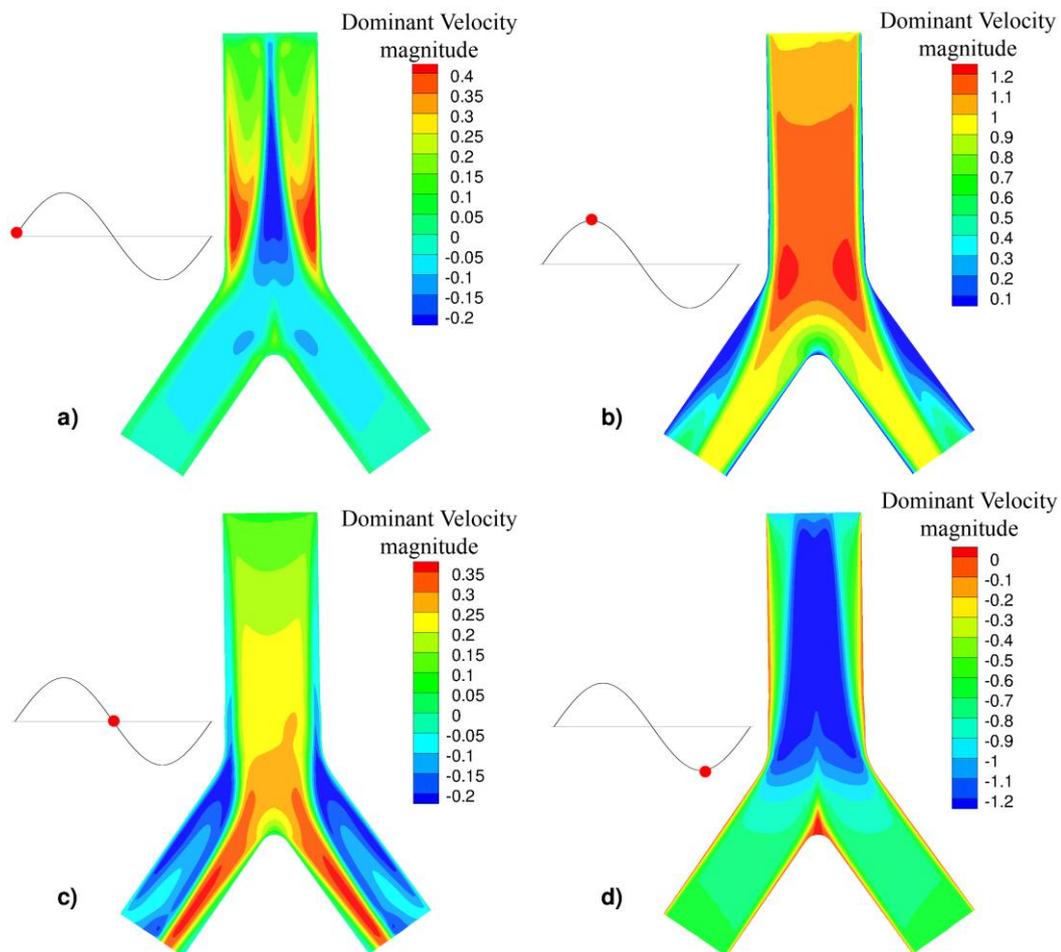


Figure 3.26 : Colour contour of the dominant velocity magnitude at the plane symmetry of PBR for the HFOV case for four different time phases a)inhalation start, b) inhalation peak, c)flow reversal, d)exhalation peak.

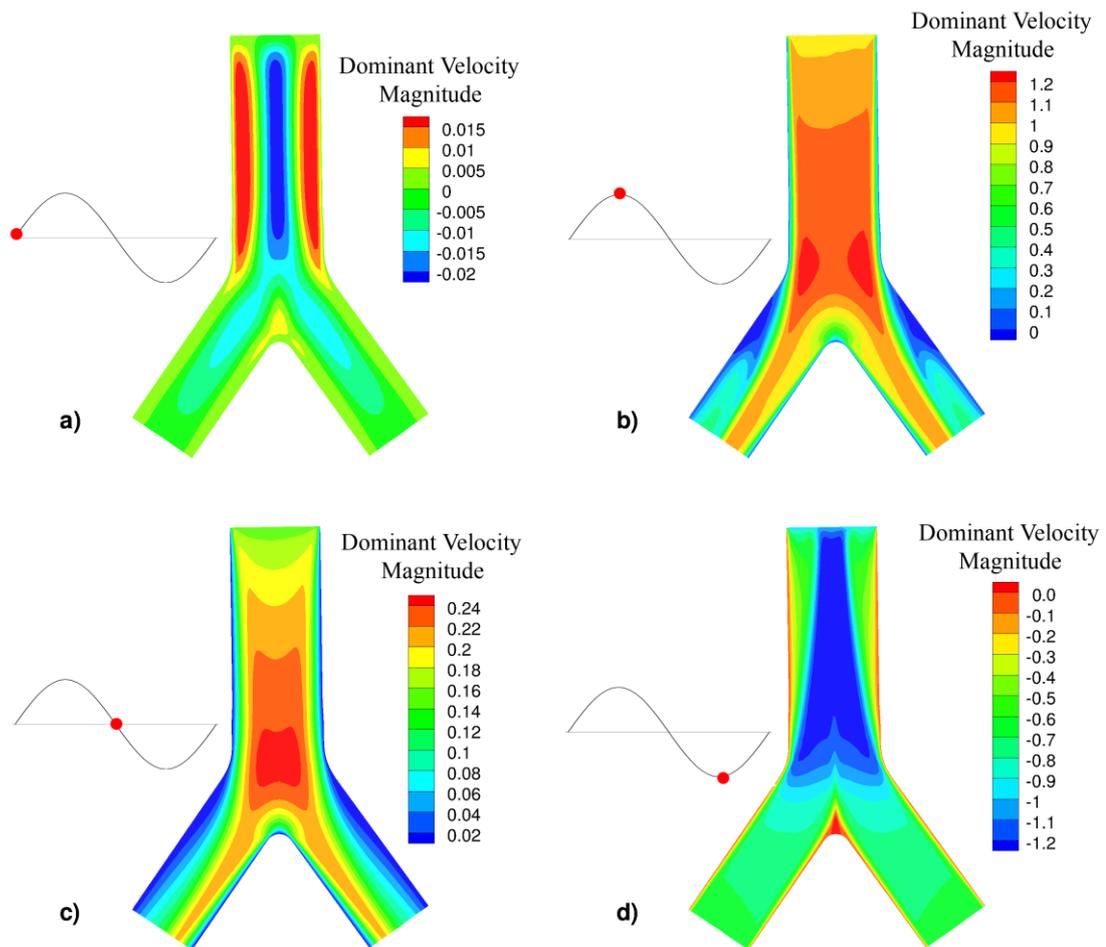


Figure 3.27 : Colour contour of the dominant velocity magnitude at the plane symmetry of PBR for the NB case for four different time phases a)inhalation start, b) inhalation peak, c)flow reversal, d)exhalation peak

The strong counter flow in the HFOV case is easily visible at the flow reversal phase while the flow in the NB case is one-way at almost every time step. This remark is consistent with Heraty et al. [2008] and Lunkenheimer et al. [1972] who concluded that the increase of oscillation frequency will increase the counter flow effect. For the HFOV case higher velocity profiles are observed at the core of the tube and thinner boundary layers near the wall. The formation of the thinner boundary layers is expected based on the fact that the HFOV case has greater Womersley number than the NB case.

Furthermore the secondary flows on cross sections near the two outlets show additional differences of the HFOV against NB flow fields. Surface streamlines and secondary velocity contour magnitudes for defined planes are presented for both cases in Figure 3.28 (named A-A' plane near the end of the main branch and named B-B' plane near the middle of the left bifurcation leg). For the HFOV case a strong pair of vortices is found in both daughter airways near the exit of the bifurcation. For the NB condition these vortices cannot be observed. Moreover the HFOV case presents stronger secondary flows with higher velocity magnitude than the NB case. This remark is critical because secondary flows are reported to be strongly related with particle deposition [Hofmann et al. 2001]. For both cases the region near the carinal ridge remains less influenced in every flow inversion and presents small fluid velocities almost at any flow phase. This fact leads to particle “entrapment” and increased deposition near the carinal ridge wall.

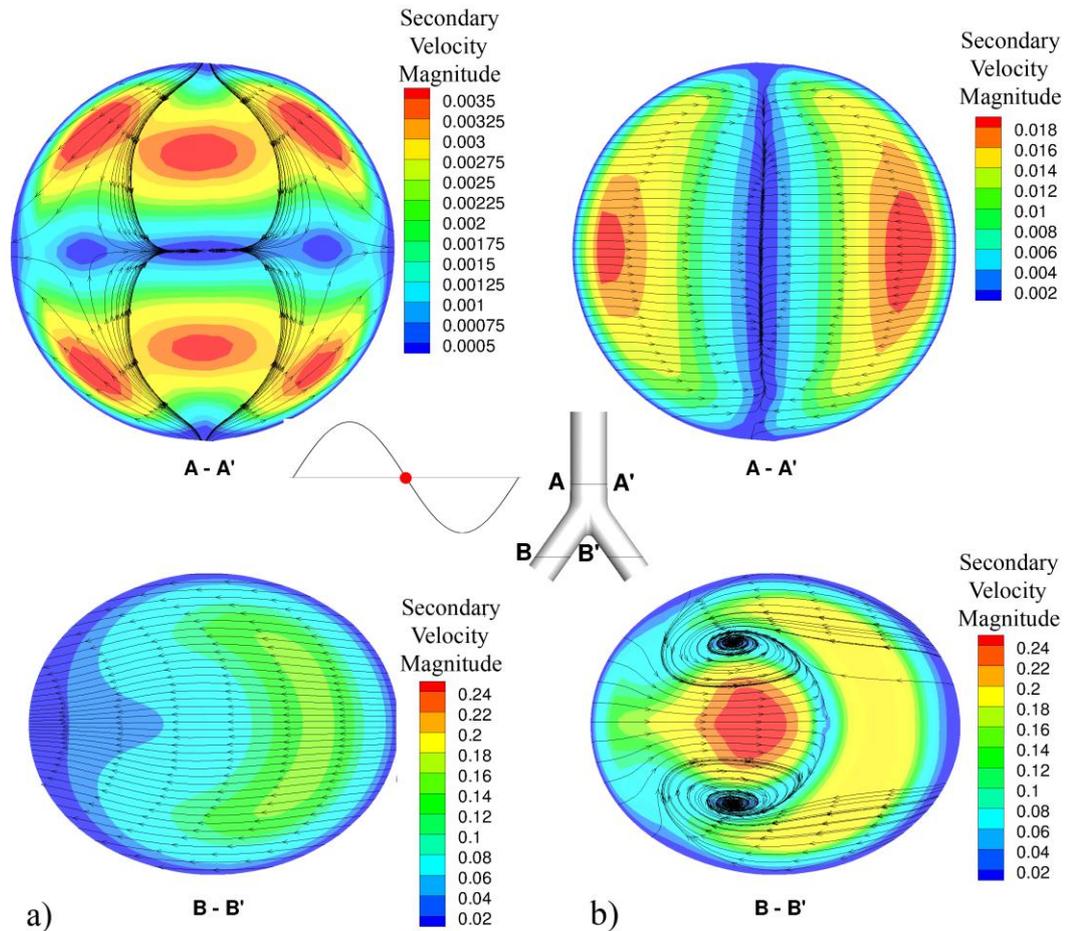


Figure 3.28: Surface streamlines and secondary velocity contour magnitudes at a plane near the exit of the G3 – G4 bifurcation at the flow reversion phase for a) HFOV and b) NB cases

It should be noted that a slight asymmetry is present for axial velocity contours between the bifurcation legs due to the rapid change in the pressure gradient. The asymmetry in bifurcating flow has been previously described in literature by experimental [Lieber B. and Zhao Y.1998] and computational studies [Hofmann et al. 2001; Zhang Z. and Kleinstreuer C. 2002].

Particles results

One of the main advantages of the Eulerian approach is that it allows an easy calculation of particle concentration profiles. The spatial distribution of particle concentration, for particles with diameter equal to 900nm, under HFOV and under NB at the wall boundary is presented in Figure 3.29. The colour scale was chosen to vary from 0.0 to 1.4 in order to visualize the dimensionless particles concentration profiles.

In the HFOV case due to the enhanced secondary flows, a substantial amount of particles deposit on the outer wall of the bifurcation legs. Furthermore during the HFOV case higher particle deposition is located near the carinal ridge

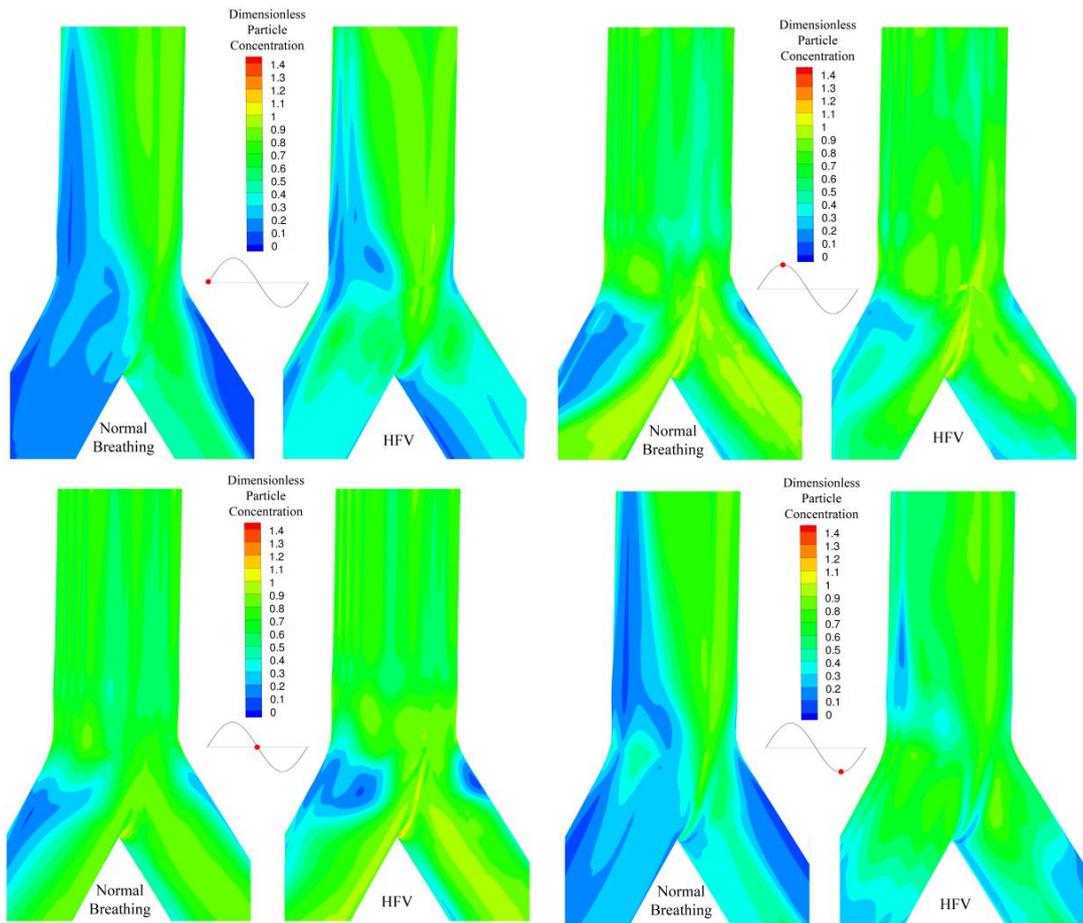


Figure 3.29: Colour contour of the particle concentration (particle diameter equal to 900nm) on the wall for the HFOV and the NB case at different time phases

Comparison of the deposition fraction for both cases

In order to produce a measurement comparison of the particle deposition under the two cases the deposition fraction was calculated for every particle size. The fraction of the deposited particles in the PBR, η , is calculated by Eq. (3.18),

$$\eta = 1 - \frac{\dot{c}|_{outlet}}{\dot{c}|_{inlet}}, \quad (3.18)$$

where $\dot{c} = \int_S c \vec{v}_p \cdot d\vec{S}$ is the dimensionless particle flow rate through a cross section of S area and the subscripts “inlet” and “outlet” refer to the bifurcation inlet and outlets respectively.

The amount of aerosol deposition during HFOV and NB is numerically evaluated for six different particle sizes. In Table 3.11 the deposition fraction for both cases and for different particle sizes is summarized. The proposed model predicted the U-shaped dependence of deposition fraction on particle diameter reported by series of particle deposition studies [Hofmann 2011].

Particle Size	HFOV	Normal Breathing
1 nm	68.74 %	61.71 %
50 nm	58.94 %	53.04 %
100 nm	58.92%	53.04 %
900 nm	58.96 %	53.07 %
5 μm	60.03 %	54.01 %
10 μm	65.66 %	57.21 %

Table 3.11: Deposition fraction of all particle sizes used in the simulation presented for HFOV and NB cases.

The HFOV shows stronger deposition for all the particle sizes. In contrast with the conclusion that HFOV would enhance the longitudinal gas transport and push gases into further generation, inertia particles show different behaviour.

The mechanisms of enhanced Secondary flows combined with strong counter flow and thinner boundary layers under the HFOV case, augment the particles deposition on the boundary walls. The particle transport and deposition mechanisms enhance deposition under HFOV compared with the NB case.

The results are consisted with other experimental and numerical studies who concluded that particle deposition in a lung model would be higher under HFOV [Alzahrani 2010] and that application of HFOV would force particles to deposit on the endotracheal tube of a pressurized meter dose inhaler medical device on an overwhelming percentage [Garner et al. 2000].

3.3.5 Conclusions

The current study is a computational simulation of transport and deposition of inertial particles, under HFOV and normal breathing conditions, inside a PRB. The computational simulation is based on a fully Eulerian (fluid and particles) model that incorporates particle inertia and diffusion at the same time. The proposed simulation offers a spatial accurate analysis that gave us insight into the particle dynamics under high frequency oscillating flow fields.

Particle dynamics and deposition analysis for six different particle sizes under two oscillatory cases (HFOV and NB) showed that different mechanisms take part compared to the mechanisms of gas transport. Although the enhancement of the longitudinal gas transport through a forced diffusion mechanism pushes gases into further generation of the bronchial tree, the same flow field functions different when it comes to particle deposition.

The highly oscillating field (HFOV) showed stronger secondary flows, thinner boundary layers and strong counter flow that accumulates and deposit particles further than a lower frequency oscillatory field (NB). Aerosol drug deposition under HFOV will conclude to stronger deposition on the upper generations of the bronchial tree compared to normal breathing. The effectiveness of that technique may be considered based on the target of the specific aerosol drug, count on the fact that the aerosol drug may not reach the lower generations of the bronchial tree and will mainly deposit on the upper generations.

Conclusions

4

The numerical modelling of particle transfer and deposition in internal aerosol flows of complex geometry is the main objective of this thesis. The motivation of this work arises from the high scientific and medical interest in patient specific models that implement precise reconstruction of human organ geometries and prediction of the behaviour of particle laden flow in them. In particular a new method for the generation of a high quality structured grid, which represents the geometry of human organs, starting from medical imaging examination data is proposed. Furthermore the mechanisms underlying the particles - fluid interactions are investigated employing techniques of fluid dynamics and a transient particle transport and deposition fully Eulerian model.

Recent advances in medical imaging examinations have made it possible for patient-specific analysis of bio fluid flows in terms of computational mechanics. A number of studies used patient specific geometries to simulate in vivo flows by means of Computational Fluid Dynamics (CFD) analysis. The former studies may be classified according to the type of the computational domain used and the geometrical fidelity between the computational domain and the physical domain. The majority of those studies starting from medical imaging data and, with low effort, produce an unstructured computational domain that conforms to the human organ geometry. However a series of studies, including the present thesis, have shown that unstructured grids provide less accurate solutions than structured grids due to a number of factors, including poor alignment with the primary flow direction and increased numerical diffusion.

Although the superiority of the structured grid domain is evident, only a few studies use structured grids for the modelling of patient specific geometries due to the significant time and effort required for the generation of such grids. Most of the studies in that classification describe the human organ geometry by template parametric planes or use Non-Uniform Rational Basis Spline (NURBS) functions and deform template meshes in order to conform to the geometrical description. Furthermore, few studies employ information of a surface triangulation (STL type surface representation) in order to deform structured template meshes and reproduce the patient specific shape. The common characteristic in these studies is the production of a high quality structured grid compromised with the disadvantage of an approximate surface representation.

A novelty of this thesis is the introduction of a new method combining structured grid generation with absolute fidelity to the patient specific geometry. Starting from data obtained from a medical imaging examination, the reconstruction of the human organ geometry concluding to a surface triangulation (STL type surface representation) is done. From this surface triangulation a high quality multi-block structured grid that absolutely conforms to the surface is generated through reparametrization. For the evaluation of the proposed method a series of comparisons between different grid types (unstructured and hybrid) were carried out. The comparisons confirmed the superiority of the structured grid in many aspects. Furthermore, the proposed method is applicable to bifurcation geometries inside the human body and generates high quality computational domains with simple topology that may be combined with computational fluid dynamics (CFD) and computational fluid particle dynamics models (CFPD).

The motivation of modeling particle transport and deposition arises from the high scientific interest in the behavior of micro- nano- particles inside the human respiratory tract. Particle transport and deposition modeling tends to be a matter of necessity, especially in cases where the direct experimental determination is limited to total deposition and in cases where experimental studies are either forbidden due to ethical consideration or impossible due to highly oscillating flow fields.

In this thesis a CFPD model formerly introduced by Pilou et. al. [2011] was further developed in order to simulate unsteady fluid and particle flows. In the proposed two phase (fluid-particle) model the handling of the equation that governs the transport of particles (PTE) is done based on a fully Eulerian approach, for both air and particle phases. The developed Eulerian approach provides us with advantages over the frequently used Lagrangian approach. The developed approach incorporates particle diffusion and inertia at the same time, decouples the mass and momentum equations of the particulate phase and directly calculates particle concentration.

The numerical treatment of the particulate phase transport is based on CFD techniques. In particular, the particles transport equation (PTE) 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 convective term is discretized using a second-order deferred correction approach, while a second-order central difference scheme is used for the diffusive term and a forward Euler scheme for the time discretization of the particles concentration.

The validation of the newly entered transient term is achieved through comparisons with a problem that has analytical solution, while the incorporation of particle inertia in the PTE is done according to the previously developed and validated model.

Overall, the advantages of the previously developed Eulerian approach combined with the newly introduced transient term provided us with a powerful Computational Fluid Particles Dynamic (CFPD) model that can give insight into the particle dynamics of unsteady flows.

The developed methods in this thesis have been incorporated in the study of three applications of current interest to bio fluid community. The assessment of the Abdominal Aorta Aneurysm wall shear stress, the generation of an efficient computational domain for the study of an Abdominal bifurcation and the assessment of particle transport and deposition under high frequency oscillatory ventilation and normal breathing.

The following results related to patient specific grid generation have been obtained from the Abdominal Aorta Aneurysm and Abdominal bifurcation applications.

- The use of structured grid provides more smooth flow fields. The unstructured grid shows evidence of high numerical skewness with the occurrences of rough velocity transition over neighboring geometrical points
- The structured grid tends to be more accurate in the simulation of secondary flows and resolve more secondary vortices in the flow field.
- The use of unstructured grids results to the underestimation of the secondary velocities and may lead to a calculation of lower vertical pressure on the wall and a shear strain rate underestimation.
- Structured grids achieve independence of flow solution with fewer elements. It is noted that tetrahedral meshes typically require 4-10 times more elements than a hexahedral mesh to obtain the same level of accuracy.
- The use of structured grids reduced run times compared with unstructured grids.

- For branching geometries the use of a structured grid is far more efficient and produces flow simulations with low numerical skewness and fast convergence. Furthermore the use of a ‘one block per branch’ topology, has the advantage of topological simplicity. It also provides the ability to create multiple branching geometries without the structured grid resolution limitations of former topologies, such as the butterfly topology. The cost of the topological simplicity is the production of computational domains that contain a few skewed elements in the block corners.

The following results related to particle transfer and deposition has been obtained by the numerical study of particle transport and deposition under high frequency oscillatory ventilation and normal breathing.

- There is a particle-free region at the outer wall, at the beginning of the daughter tubes opposite the bifurcation, which is present in almost all time phases.
- Different mechanisms considering particle transport take part compared to the mechanisms of gas transport.
- The enhancement of the longitudinal gas transport through a forced diffusion mechanism pushes gases into further generation of the bronchial tree, however the same flow field functions different when it comes to particle deposition
- Aerosol drug deposition under HFOV will conclude to stronger deposition on the upper generations of the bronchial tree compared to normal breathing.

In inner flows of bio-fluids, small differentiations in the human organ geometry may be important and responsible for various physical phenomena. In this thesis an effective technique has been developed for multi-block structure grid generation of a patient-specific geometry. The generation of a high quality grid permits a numerical simulation to be performed with respect to the underlying physics and numerical accuracy. Therefore the proposed technique may be a step towards patient specific models, capable to provide accurate medical diagnosis and prognosis on clinical time scale.

The aforementioned conclusions demonstrate that accurate predictions of the transport and deposition of heavy, inert particles suspended in highly unsteady flows are obtained by the proposed methodology. 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 in a straightforward manner, under conditions where direct experimental methods are inapplicable.

Overall the proposed methodology is a considerable step towards patient specific modeling of CFPD simulations. The methodology may be further improved in the part of the grid generation by adding more automation, thus reducing user intervention and time demand. Additionally different topologies may be incorporated for the grid generation and the methodology may be used on bio-fluid system simulations with more than two outlets such as the aortic arch or a multiple branching lung model. A further improvement in the particle transfer and deposition model may be the incorporation of more physical phenomena involved in such

multiphase flow systems. For example, the model may be substantially improved, if internal aerosol processes are incorporated in it, thus solving the full General Dynamic Equation of Particles. Finally, the tight integration and interconnection of all the software components presented in this thesis in an open source graphical user interface (GUI) will produce a strong and versatile CFPD tool.



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΠΡΟΣΚΡΟΥΣΗΣ -
ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ ΜΙΚΡΟ-ΝΑΝΟ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΕ
ΕΣΩΤΕΡΙΚΕΣ ΡΟΕΣ ΑΕΡΟΛΥΜΑΤΟΣ
ΠΟΛΥΠΛΟΚΗΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ**

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ ΜΑΚΡΗΣ

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:
Σ. ΤΣΑΓΓΑΡΗΣ
Καθηγητής Ε.Μ.Π.**

ΑΘΗΝΑ, ΜΑΙΟΣ 2013



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΠΡΟΣΚΡΟΥΣΗΣ - ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ ΜΙΚΡΟ-ΝΑΝΟ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΕ ΕΣΩΤΕΡΙΚΕΣ ΡΟΕΣ ΑΕΡΟΛΥΜΑΤΟΣ ΠΟΛΥΠΛΟΚΗΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ ΜΑΚΡΗΣ

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

1. Σ. Τσαγγάρης, Καθ. Ε.Μ.Π. (επιβλέπων)
2. Χρ. Χουσιάδας, Ερευνητής Α' Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»
3. Ι. Αναγνωστόπουλος, 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. Ι. Αναγνωστόπουλος, Αναπλ. Καθ. Ε.Μ.Π.
4. Δ. Παπαντώνης, Καθ. Ε.Μ.Π.
5. Δ. Μαθιουλάκης, Αναπλ. Καθ. Ε.Μ.Π.
6. Σ. Βουτσινάς, Αναπλ. 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, ΜΑΙΟΣ 2013

Περιεχόμενα

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	117
ΠΕΡΙΛΗΨΗ	119
ΕΙΣΑΓΩΓΗ 1	121
ΘΕΩΡΙΑ 2	127
2.1 ΓΕΝΕΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΣΕ ΠΟΛΥΠΛΟΚΕΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ	128
2.1.1 ΘΕΩΡΙΑ ΓΕΝΕΣΗΣ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	128
2.1.2 ΓΕΝΕΣΗ ΔΟΜΗΜΕΝΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΑΠΟ ΤΡΙΓΩΝΙΚΕΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ ΙΑΤΡΙΚΗΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗΣ	131
2.1.3 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	136
2.2 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ	137
2.2.1 ΣΥΝΕΧΗΣ ΦΑΣΗ	137
2.2.2 ΔΙΑΚΡΙΤΗ ΦΑΣΗ	137
2.2.3 ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕΘΟΔΟΥ	142
2.2.4 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	143
	145
ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ 3	
3.1 Ένα εξατομικευμένο μοντέλο ανευρύσματος κοιλιακής αορτής (ΑΚΑ)	146
3.1.1 Εξατομικευμένες πραγματικές γεωμετρίες και γενεση πλεγματος	146
3.1.2 Αποτελέσματα από την προσομοίωση ροής αίματος εντός του ΑΚΑ	149
3.1.4 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	153
3.2 ΓΕΝΕΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΣΕ ΜΙΑ ΕΞΑΤΟΜΙΚΕΥΜΕΝΗ ΠΡΑΓΜΑΤΙΚΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ ΑΠΟ ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΙΑΤΡΙΚΗΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗΣ	154
3.2.1 ΕΞΑΤΟΜΙΚΕΥΜΕΝΗ ΠΡΑΓΜΑΤΙΚΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ ΚΑΙ ΓΕΝΕΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	154
3.2.3 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΜΕ ΜΗ ΔΟΜΗΜΕΝΑ ΠΛΕΓΜΑΤΑ.	157
3.2.4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	161
3.3 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΥΠΟ ΠΕΔΙΟ ΡΟΗΣ ΥΨΙΣΥΧΝΟΥ ΤΑΛΑΝΤΕΥΤΙΚΟΥ ΑΕΡΙΣΜΟΥ ΚΑΙ ΦΥΣΙΟΛΟΓΙΚΗΣ ΑΝΑΠΝΟΗΣ	162
3.3.1 ΡΟΗ ΑΕΡΑ ΥΠΟ ΠΕΔΙΟ ΡΟΗΣ ΥΨΙΣΥΧΝΟΥ ΤΑΛΑΝΤΕΥΤΙΚΟΥ ΑΕΡΙΣΜΟΥ	162
3.3.2 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΥΠΟ ΠΕΔΙΟ ΡΟΗΣ ΥΨΙΣΥΧΝΟΥ ΤΑΛΑΝΤΕΥΤΙΚΟΥ ΑΕΡΙΣΜΟΥ	163
3.3.3 ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΚΑΙ ΠΛΕΓΜΑ	163
3.3.4 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ.	164
3.3.5 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	168
	171
ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ 4	

Περίληψη

Η παρούσα διατριβή μελετά τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε ροές αερολύματος στο εσωτερικό πολύπλοκων γεωμετριών. Για να προσεγγιστεί αριθμητικά το φυσικό πρόβλημα της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων σε ροές αερολύματος πολύπλοκης γεωμετρίας, πρέπει κανείς να αντιμετωπίσει την πρόκληση της δημιουργίας ενός υπολογιστικού χωρίου σύνθετης γεωμετρίας και υψηλής ποιότητας. Επιπλέον, η μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων πρέπει να αναπαρασταθεί με έναν φυσικά έγκυρο τρόπο με τη χρήση μερικών διαφορικών εξισώσεων.

Στην παρούσα διατριβή προτείνεται μια νέα μέθοδος για την παραγωγή ενός υψηλής ποιότητας δομημένου πλέγματος, το οποίο αναπαράγει με πιστότητα την γεωμετρία των ανθρώπινων οργάνων, ξεκινώντας από δεδομένα ιατρικά απεικόνισης. Επιπλέον, διερευνώνται οι μηχανισμοί που διέπουν τις αλληλεπιδράσεις σωματιδίων - ρευστών χρησιμοποιώντας τεχνικές της μηχανικής των ρευστών και εισάγεται μια περαιτέρω βελτίωση σε ένα ήδη υπάρχον μοντέλο μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων.

Όσον αφορά την δημιουργία υπολογιστικών χωρίων εντός πολύπλοκων γεωμετρικών, ένας σημαντικός αριθμός παλαιότερων μελετών χρησιμοποίησαν πραγματικές γεωμετρίες για την προσομοίωση ροών μέσω της Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής (CFD). Αυτές οι μελέτες μπορούν να ταξινομηθούν ανάλογα με το είδος του χρησιμοποιούμενου υπολογιστικού πλέγματος και τη γεωμετρική πιστότητα μεταξύ του πλέγματος και της φυσικής γεωμετρίας. Η πλειοψηφία αυτών των μελετών ξεκινώντας από δεδομένα ιατρικής απεικόνισης παράγουν ένα μη δομημένο υπολογιστικό πλέγμα που συμμορφώνεται με τη γεωμετρία του ανθρώπινου οργάνου. Ωστόσο, μια σειρά από μελέτες, συμπεριλαμβανομένης της παρούσας διατριβής, έχουν δείξει ότι τα μη δομημένα πλέγματα παρέχουν λιγότερο ακριβείς λύσεις από ό, τι τα δομημένα.

Μια καινοτομία της διατριβής είναι η εισαγωγή μιας νέας μεθόδου που συνδυάζει την παραγωγή δομημένου πλέγματος με απόλυτη πιστότητα στην συγκεκριμένη γεωμετρία του ασθενούς. Ξεκινώντας από δεδομένα που λαμβάνονται από μια ιατρική εξέταση απεικόνισης, γίνεται η ανακατασκευή της γεωμετρίας του ανθρώπινου οργάνου καταλήγοντας σε μια τριγωνοποιημένη επιφάνεια (αναπαράσταση επιφάνειας τύπου STL). Από αυτή την επιφανειακή τριγωνοποίηση δημιουργείται ένα υψηλής ποιότητας δομημένο πλέγμα που συμπίπτει απόλυτα με την αρχική γεωμετρία. Για την αξιολόγηση της προτεινόμενης μεθόδου εκτελέστηκαν μία σειρά από συγκρίσεις μεταξύ διαφορετικών τύπων πλέγματος (μη δομημένα και υβριδικά πλέγματα). Οι συγκρίσεις επιβεβαίωσαν την υπεροχή του δομημένου πλέγματος σε πολλά επίπεδα.

Όσον αφορά την πρόκληση της μοντελοποίησης της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων, πρέπει να σημειωθεί ότι η μοντελοποίηση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων τείνει να είναι ζήτημα αναγκαιότητας, ειδικά σε περιπτώσεις όπου η άμεση πειραματική μελέτη περιορίζεται σε προσδιορισμό της συνολικής εναπόθεσης και σε περιπτώσεις όπου οι πειραματικές μελέτες είτε απαγορεύονται λόγω ηθικών λόγων ή είναι αδύνατες λόγω των εξαιρετικά πολύπλοκων πεδίων ροής.

Σε αυτή τη διατριβή ένα μοντέλο υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και δυναμικής σωματιδίων που προτάθηκε παλαιότερα αναπτύχθηκε περαιτέρω, προκειμένου να προσομοιώσει χρονικά μεταβαλλόμενες ροές σωματιδίων. Στο προτεινόμενο διφασικό (υγρό-σωματίδια) μοντέλο ο χειρισμός της εξίσωσης που διέπει τη μεταφορά των σωματιδίων (PTE) γίνεται με βάση μια πλήρως Eulerian προσέγγιση που βασίζεται σε τεχνικές υπολογιστικής ρευστομηχανικής, τόσο για τον αέρα όσο και για την φάση των σωματιδίων. Η επικύρωση του

νεοεισαγόμενου όρου της χρονικής μεταβολής επιτυγχάνεται μέσω συγκρίσεων με ένα πρόβλημα που έχει αναλυτική λύση, ενώ η ενσωμάτωση της αδράνειας των σωματιδίων στην εξίσωση μεταφοράς (PTE) γίνεται σύμφωνα με το προηγουμένως αναπτυχθέν και επικυρωθέν μοντέλο. Συνολικά, τα πλεονεκτήματα της θεώρησης Euler, σε συνδυασμό με τον νέο εισαγόμενο όρο της χρονικής μεταβολής δίνουν ένα ισχυρό υπολογιστικό μοντέλο που μπορεί να παρέχει πληροφορία για τη μεταφορά και εναπόθεση των σωματιδίων υπό ασταθείς ροές και μπορεί να συμβάλει στην ερμηνεία της συμπεριφοράς των σωματιδίων κάτω από εξαιρετικά ασταθείς ροές στο αναπνευστικό σύστημα.

Οι μέθοδοι που έχουν αναπτυχθεί σε αυτή τη διατριβή έχουν εφαρμοστεί στη μελέτη τριών περιπτώσεων. Στην εκτίμηση της ροής εντός ανευρύσματος κοιλιακής αορτής, στη μελέτη μιας διακλάδωσης της κοιλιακής αορτής και στην αξιολόγηση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων υπό πεδίο ροής υψίσυχνου ταλαντευτικού αερισμού και κανονικής αναπνοής. Τα συμπεράσματα που προέκυψαν από τις παραπάνω μελέτες δείχνουν ότι με την προτεινόμενη μεθοδολογία μπορούν να ληφθούν ακριβείς προβλέψεις της μεταφοράς και εναπόθεσης αδρανών σωματιδίων αερολυμάτων σε μη μόνιμες ροές εντός πολύπλοκων γεωμετριών.

Εν κατακλείδι, η προτεινόμενη μεθοδολογία είναι ένα σημαντικό βήμα προς την κατεύθυνση μοντελοποίησης εξατομικευμένων περιπτώσεων ασθενών με χρήση της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και δυναμικής σωματιδίων (CFPD).

Εισαγωγή

1

Στη σημερινή εποχή η επιστήμη της Υπολογιστικής Μηχανικής (CM) μπορεί να συμβάλλει στη μελέτη και πρόβλεψη πολύπλοκων φαινομένων που αναπτύσσονται μέσα στο ανθρώπινο σώμα. Σε εφαρμογές όπως η ροή του αέρα στο αναπνευστικό σύστημα, η εναπόθεση σωματιδίων στον πνεύμονα, η ροή του αίματος στο καρδιαγγειακό σύστημα, η άμεση μέτρηση του πεδίου ροής και ο προσδιορισμός της μεταφοράς και εναπόθεσης των σωματιδίων είναι μια εξαιρετικά απαιτητική ή ακόμη και αδύνατη διαδικασία. Επιπλέον, η πρόβλεψη της εξέλιξης των φυσικών φαινομένων που εμφανίζονται στις προαναφερθείσες περιπτώσεις είναι αδύνατο να επιτευχθεί με τη χρήση άμεσων μεθόδων μέτρησης. Σε αυτές τις περιπτώσεις, η προσομοίωση των φαινομένων in-silico είναι εφικτή μέσω της χρήσης τεχνικών ιατρικής απεικόνισης και του συνδυασμού τους με μεθόδους Υπολογιστικής Μηχανικής (CM).

Για να προσεγγιστεί αριθμητικά το φυσικό πρόβλημα της πρόσκρουσης και εναπόθεσης σωματιδίων σε εσωτερικές ροές αερολύματος πολύπλοκης γεωμετρίας, πρέπει κανείς να αντιμετωπίσει την πρόκληση της δημιουργίας ενός υπολογιστικού χωρίου σύνθετης γεωμετρίας και υψηλής ποιότητας. Επιπλέον, η μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων πρέπει να αναπαρασταθεί με έναν φυσικά έγκυρο τρόπο με τη χρήση μερικών διαφορικών εξισώσεων. Όσον αφορά την δημιουργία υπολογιστικών χωρίων εντός πολύπλοκων γεωμετρικών, ένας σημαντικός αριθμός παλαιότερων μελετών χρησιμοποίησαν πραγματικές γεωμετρίες για την προσομοίωση ροών μέσω της Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής (CFD). Χαρακτηριστικά δείγματα τέτοιων εργασιών περιλαμβάνουν την προσομοίωση της ροής του αίματος στο εσωτερικό της καρωτιδικής διακλάδωσης [Deshpande 2009; Lee, S. W. et al 2008], τη διακλάδωση της κοιλιακής αορτής [Long, Q. et al. 1998; Shim M. B. et al 2009; Wolters, B. J. et al 2005], το ανεύρυσμα της κοιλιακής αορτής [Shim et al. 2009; Wolters et al. 2005] και τη ροή του αέρα σε συνδυασμό με την εναπόθεση σωματιδίων στο αναπνευστικό σύστημα [Longest P. W. and Vinchurkar S. 2007; Vinchurkar S. and Longest P. W. 2008]. Επιπλέον προσομοίωση τύπου CFD έχει χρησιμοποιηθεί για την πρόβλεψη της μεταβολής της ροής του αίματος μετά από μια εμφύτευση στο καρδιαγγειακό σύστημα [Bazilevs, Y., et al. 2009].

Οι ερευνητικές μελέτες που αναπτύσσουν προσομοιώσεις υπολογιστικής ρευστομηχανικής με χρήση υπολογιστικών χωρίων που βασίζονται σε πραγματικές ανθρώπινες γεωμετρίες μπορούν να ταξινομηθούν με δύο βασικά κριτήρια, τον τύπο υπολογιστικού πλέγματος που χρησιμοποιούν και την γεωμετρική πιστότητα ανάμεσα στο υπολογιστικό χωρίο και την πραγματική γεωμετρία.

Η χρήση των μη-δομημένων υπολογιστικών πλεγμάτων είναι συχνά προτιμητέα, διότι παρέχουν εύκολη δημιουργία πλέγματος σε πολύπλοκες γεωμετρίες σε συνδυασμό με ισχυρή πιστότητα διατήρηση του γεωμετρικού σχήματος. Μια σειρά από μελέτες [Di Martino et al. 2001; Deshpande M.D. et al. 2009; Hammer S. et al. 2009; Lee S. W. et al 2008; Shim M. B. et al. 2009; Antiga L. et al. 2008; Hammer S. et al. 2009; Peiro J. et al 2008; Doyle et al. 2008; 2010] βασίζονται σε δεδομένα ιατρικής απεικόνισης και με τη χρήση ενός εμπορικού (ή/και ιδιοκατασκευασμένου) λογισμικού γένεσης πλέγματος δημιουργούν ένα μη δομημένο υπολογιστικό πλέγμα. Ωστόσο, η χρήση μη-δομημένων πλεγμάτων παρέχει λιγότερο ακριβείς λύσεις σε σχέση με τα δομημένα πλέγματα. Αυτό οφείλεται σε μια σειρά παραγόντων, συμπεριλαμβανομένης της κακής ευθυγράμμισης των πλεγματικών γραμμών με την κύρια διεύθυνση της ροής και της αυξημένης αριθμητική διάχυσης που παρουσιάζουν τα μη δομημένα πλέγματα. Οι Longest και Vinchurkar [Longest, P. W. and Vinchurkar S. 2007] συνέκριναν τις επιπτώσεις στο πεδίο ροής και τη ταχύτητα σύγκλισης των δύο τύπων πλεγμάτων (δομημένου – μη-δομημένου) σε μια περίπτωση μοντέλου διακλαδωμένων αεραγωγών. Η εργασία τους συμπεριλάμβανε και σύγκριση με πειραματικά δεδομένα. Αυτή η μελέτη έδειξε ότι το δομημένο πλέγμα

που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση ροής σε γεωμετρίες διακλάδωσης είναι καλύτερο από το μη-δομημένο επειδή:

- Η χρήση των δομημένων πλεγμάτων μείωσε το επίπεδο της αριθμητικής διάχυσης,
- Τα δομημένα πλέγματα παρουσίασαν κατά μία τάξη μεγέθους μικρότερο δείκτη σύγκλισης πλέγματος (GCI), οπότε η ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα επιτεύχθηκε με λιγότερα στοιχεία.
- Η χρήση των δομημένων πλεγμάτων μειώσει, κατά έναν παράγοντα 3 σε σύγκριση με τα μη δομημένα πλέγματα, τον χρόνο της προσομοίωσης.

Παρόμοια συμπεράσματα προκύπτουν και σε άλλη μελέτη [Vinchurkar S and Longest P.W. 2008], η οποία επιπροσθέτως επισημαίνει τη σημασία της ευθυγράμμισης των πλεγματικών γραμμών με την κυρίαρχη κατεύθυνση της ροής. Παρά το γεγονός ότι η υπεροχή του δομημένου πλέγματος είναι σαφής, λίγες μόνο μελέτες χρησιμοποιούν δομημένα πλέγματα για την μοντελοποίηση πολύπλοκων γεωμετριών. Ο κύριος λόγος είναι ο σημαντικός χρόνος και η προσπάθεια που απαιτείται για την δημιουργία αυτών των πλεγμάτων. Μια από τις πρώτες μελέτες που συνδύασε δεδομένα ιατρικής απεικόνισης με γένεση δομημένου πλέγματος είναι η εργασία του Long et. al. [1998]. Η τοπολογία του πλέγματος που προτείνεται από αυτή τη μελέτη, αναφέρεται ως "τοπολογία πεταλούδας" και έχει χρησιμοποιηθεί από πολλούς άλλους ερευνητές έκτοτε [Vinchurkar S. and Longest P.W. 2008; Longest P.W. and Vinchurkar S.2007; Antiga L. 2002; De Santis G. et al 2010 ; De Santis G. et al. 2011]. Οι παλαιότερες από αυτές τις μελέτες χρησιμοποίησαν τις κεντρικές γραμμές των αρτηριών, και συνδύαζαν επίπεδες φέτες πλεγματος με τη μέθοδο σάρωσης [Long, Q. et al. 1998; Antiga L. et al. 2002].

Οι πιο πρόσφατες και πιο εξελιγμένες μελέτες, περιγράφουν τη γεωμετρία με τη χρήση πρότυπων παραμετρικών επιπέδων [De Santis G. et al. 2010;2011] ή χρησιμοποιούν καμπύλες Spline (Non-Uniform Rational Basis Spline - NURBS) [Bazilevs Y. et al 2006;2008] και παραμορφώνουν ένα πρότυπο πλέγμα, ώστε να ανταποκρίνεται στην περιγραφή της γεωμετρίας. Σε μια πρόσφατη μελέτη [De Santis G. et al. 2010] αυτής της κατηγορίας, οι συγγραφείς συμπεραίνουν ότι η μελλοντική τάση στη γένεση δομημένων πλεγμάτων είναι η χρήση μιας πιο λεπτομερους περιγραφής του γεωμετρικού σχήματος, όπως είναι μια τριγωνοποιημένη επιφάνεια (π.χ. μοντέλα επιφάνειας τύπου Stereolithography - STL). Πρόσφατα, λίγες μελέτες έχουν ασχοληθεί με το πρόβλημα της δημιουργία δομημένου πλέγματος ξεκινώντας από STL επιφάνειες με την εφαρμογή της "τοπολογίας πεταλούδας" σε γεωμετρίες με πολλαπλές εξόδους [De Santis G. et al. 2011; Trachet B. et al. 2011; Gallo D. et al. 2011]. Το κοινό χαρακτηριστικό σε αυτές τις μελέτες είναι το υψηλής ποιότητας δομημένο πλέγμα που παράγουν με το συμβιβασμό της προσεγγιστικής αναπαράστασης της επιφάνειας.

Όσον αφορά την πρόκληση της μοντελοποίησης της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων, πρέπει να σημειωθεί ότι η μεταφορά και εναπόθεση των σωματιδίων σε βιοϊατρικές εφαρμογές καθορίζεται από πλήθος βιολογικούς και φυσικούς παράγοντες, όπως η μορφολογία του χωρίου, η δυναμική των ρευστών, οι ιδιότητες των σωματιδίων και οι μηχανισμοί εναπόθεσης.

Ένα εναιώρημα σωματιδίων εντός ρευστού είναι ένα πολυφασικό σύστημα που αποτελείται από ένα μίγμα δυο φάσεων. Δύο είδη διφασικών συστημάτων έχουν ιδιαίτερη σημασία στις βιοϊατρικές εφαρμογές, το εναιώρημα στερεών ή υγρών σωματιδίων εντός αερίου, που αναφέρεται ως αεροζόλ, και το εναιώρημα στερεών σωματιδίων εντός υγρού, που αναφέρεται ως κολλοειδές.

Η μοντελοποίηση της μεταφοράς και εναπόθεσης των σωματιδίων μπορεί να είναι ιδιαίτερα επωφελής σε δύο συγκεκριμένα σημεία: α) μπορεί να παρέχει χρήσιμες φυσικές πληροφορίες που επιτρέπουν την ερμηνεία φυσικών φαινομένων χωρίς την ανάγκη πειραμάτων, και β) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διερεύνηση και παραμετρική βελτιστοποίηση ήδη αναπτυγμένων εφαρμογών.

Μια συνεχώς αναπτυσσόμενη προσέγγιση για τη μοντελοποίηση των διαφασικών συστημάτων υγρών - σωματιδίων είναι τα μοντέλα τοπικής κλίμακας, όπου οι εξισώσεις μεταφοράς και εναπόθεσης λύνονται με αριθμητικές μεθόδους. Τα μοντέλα τοπικής κλίμακας παρέχουν πληροφορίες σχετικά με την εναπόθεση σωματιδίων εντός επιλεγμένων γεωμετρικών περιοχών και έχουν ισχυρό φυσικό υπόβαθρο, έτσι είναι ιδιαίτερα κατάλληλα για την προσομοίωση των φυσικών φαινομένων των περίπλοκων ροών αερολύματος εντός του αναπνευστικού συστήματος [Housiadas and Lazarides 2010].

Τα υπολογιστικά μοντέλα τοπικής κλίμακας μπορεί να διαιρεθούν περαιτέρω σε δύο μεγάλες κατηγορίες με βάση το πλαίσιο που χρησιμοποιείται για την περιγραφή της κίνησης του ρευστού και των σωματιδίων. Τη Lagrangian περιγραφή, όπου χρησιμοποιείται ένα μετακινούμενο πλαίσιο αναφοράς, και την Eulerian περιγραφή, όπου χρησιμοποιείται ένα σταθερό πλαίσιο αναφοράς.

Η Lagrangian περιγραφή της σωματιδιακής φάσης έχει χρησιμοποιηθεί ευρέως για τον προσδιορισμό της μεταφοράς και της εναπόθεσης σωματιδίων. Αντιπροσωπευτικές αριθμητικές έρευνες έχουν πραγματοποιηθεί από τους Crane και Evans [1977] και από τους Tsai και Pui [1990]. Επιπλέον οι Breuer et al. [2006] ανέπτυξαν μια προσομοίωση μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων σε σωλήνα κυκλικής διατομής 90ο μοιρών με τη χρήση Lagrangian προσομοίωσης για την παρακολούθηση της σωματιδιακής φάσης.

Ωστόσο, ο προσδιορισμός σημαντικών μεγεθών όπως, για παράδειγμα, το σχήμα της τοπική συγκέντρωσης σωματιδίων [Slater and Young 2001], είναι ιδιαίτερα δύσκολο να υπολογιστούν από Lagrangian προσεγγίσεις. Επιπλέον, η παρουσία του αριθμητικού σφάλματος που σχετίζεται με Lagrangian προσομοιώσεις καθίσταται εξαιρετικά σημαντική για ανομοιόμορφες κατανομές σωματιδίων καθώς ο αριθμός των σωματιδίων που υπολογίζονται ανά κελί πλέγματος μειώνεται, ενώ το στατιστικό σφάλμα αυξάνει [Garg et al. 2009]. Παρομοίως, εάν η διάχυση Brown των σωματιδίων θεωρείται σημαντική, ο αριθμός των προσομοιωμένων τροχιών σωματιδίων αυξάνει περαιτέρω με στόχο την ελαχιστοποίηση του θορύβου που προκύπτει από την стоχαστική διαχυτική κίνηση των σωματιδίων. Ως αποτέλεσμα των παραπάνω, πρέπει να υπολογιστεί ένας μεγάλος αριθμός τροχιών σωματιδίων για να ελαχιστοποιηθεί το στατιστικό σφάλμα [Desjardins et al. 2008], καθιστώντας τη Lagrangian προσέγγιση υπολογιστικά απαιτητική.

Μια αρχική εναλλακτική λύση για την μοντελοποίηση σωματιδίων είναι το έργο του Armand et al. [1998] ο οποίος πρότεινε μια πλήρη θεώρηση Euler που περιλάμβανε αδρανειακή μετατόπιση των σωματιδίων σε ένα μοντέλο δύο ρευστών. Επιπροσθετως οι μελέτες των [Longest and Oldham 2008; Xi and Longest 2008a; Xi and Longest 2008b] θεωρούνται χαρακτηριστικές Eulerian προσεγγίσεις που υπολογίζουν τοπική συγκέντρωση και εναπόθεση σωματιδίων.

Στην παρούσα διατριβή προτείνουμε την χρήση μιας Eulerian-Eulerian περιγραφής ενός αραιού διαφασικού συστήματος ρευστού - σωματιδίων στο όριο του χαμηλού φορτίου μάζας και μικρών λόγων όγκου. Στην Eulerian περιγραφή της σωματιδιακής φάσης προσεγγίζουμε την ταχύτητα των σωματιδίων με μια έκφραση στο όριο των μικρών χρόνων χαλάρωσης των σωματιδίων και την ενσωματώνουμε στην τροποποιημένη εξίσωση ισορροπίας πληθυσμού των σωματιδίων (particle balance equation - PBE).

Η προτεινόμενη Eulerian προσέγγιση προσφέρει σημαντικά πλεονεκτήματα έναντι των προηγούμενων Eulerian μοντέλων που δεν αποσυνδέουν τις εξισώσεις διατήρησης μάζας και ορμής της σωματιδιακής φάσης.

Στο προτεινόμενο μοντέλο η αριθμητική επίλυση της εξίσωσης ορμής των σωματιδίων δεν είναι υποχρεωτική για να καθοριστεί το πεδίο σωματιδιακών ταχυτήτων. Ως αποτέλεσμα, η ταχύτητα των σωματιδίων εκφράζεται αποκλειστικά με όρους την ταχύτητα του ρευστού και τις χρονικές παράγωγους της. Επιπλέον, η προτεινόμενη προσέγγιση προσφέρει σημαντικά πλεονεκτήματα έναντι των Lagrangian προσεγγίσεων, δεδομένου ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί για μικρές διαμέτρους σωματιδίων, όπου η επίλυση των εξισώσεων κίνησης των σωματιδίων, σε μια Lagrangian προσέγγιση, γίνεται αριθμητικά απαιτητική. Επιπροσθέτως, η προτεινόμενη προσέγγιση μπορεί να θεωρηθεί ως πιο ακριβής, δεδομένου ότι λαμβάνει υπόψη την αδρανειακή και την διαχυτική συμπεριφορά των σωματιδίων ταυτοχρόνως.

Η παρούσα διατριβή μελετά τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε εσωτερικές ροές αερολύματος στο εσωτερικό πολύπλοκων γεωμετριών. Στόχος της παρούσας εργασίας είναι να εισαγάγει μια νέα μέθοδο που να συνδυάζει τη δημιουργία δομημένου πλέγματος σε πραγματικές γεωμετρίες, με τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων με βάση μια προσέγγιση Euler.

Με αφετηρία δεδομένα που λαμβάνονται από μία εξέταση ιατρικής απεικόνισης, μια τριγωνοποιημένη επιφάνεια σχηματίζεται. Από αυτή την επιφανειακή τριγωνοποίηση παράγεται ένα υψηλής ποιότητας δομημένο πλέγμα με απόλυτη πιστότητα στο φυσικό σχήμα. Η προτεινόμενη μέθοδος παράγει υψηλής ποιότητας υπολογιστικά χωρία που μπορούν να συνδυαστούν με μοντέλα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD) και υπολογιστικά μοντέλα δυναμικής σωματιδίων (CFPD).

Η βασική ιδέα της προτεινόμενης μοντελοποίησης μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων είναι ο χειρισμός της εξίσωσης ισορροπίας πληθυσμού των σωματιδίων (particle balance equation - PBE) με Eulerian περιγραφή σε περιπτώσεις χρονικά μεταβαλλόμενων ροών.

Η εξίσωση PBE εξετάζει διεργασίες αερολύματος (π.χ., μεταφορά, πυρήνωση, ανάπτυξη και πήξης) σε ένα σταθερό στοιχειακό όγκο έτσι η διάχυση των σωματιδίων μπορεί να αντιμετωπιστεί άμεσα και η συγκέντρωση των σωματιδίων υπολογίζεται με απλό τρόπο. Ωστόσο, οι όροι τις αδράνειας των σωματιδίων δεν μπορούν εύκολα να συμπεριληφθούν στην εξίσωση PBE. Με βάση προηγούμενες μελέτες που έγιναν από τους Pilou et al. [2011; 2013] αναπτύχθηκε μια επικυρωμένη, υπολογιστικά αποδοτική και πλήρως Eulerian (υγρό και σωματίδια) προσέγγιση που ενσωματώνονται οι όροι αδράνειας και οι επιδράσεις εξωτερικών δυνάμεων στην PBE. Η παρούσα εργασία αναπτύσσει περαιτέρω το προαναφερόμενο μοντέλο με στόχο την προσομοίωση χρονικά μεταβαλλόμενων πεδίων ροής. Ο στόχος είναι η καλύτερη κατανόηση των μηχανισμών της μεταφοράς και εναπόθεση σωματιδίων εντός μη σταθερών πεδίων ροής ή/και σωματιδίων.

Εξ' όσων γνωρίζουμε, η προτεινόμενη μέθοδος είναι η πρώτη που επιτρέπει την δημιουργία δομημένου πλέγματος με απόλυτη πιστότητα στο φυσικό σχήμα ξεκινώντας από δεδομένα ιατρικής απεικόνισης. Επιπλέον, αυτή είναι η πρώτη φορά που η μεταφορά και εναπόθεση αδρανειακών σωματιδίων προσομοιώνεται, χρησιμοποιώντας μια Eulerian προσέγγιση της εξίσωσης μεταφοράς σωματιδίων, εντός χρονικά μεταβαλλόμενων ροών.

Όπως φαίνεται σε μια σειρά από πρακτικές εφαρμογές που έχουν αναπτυχθεί στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής, η προτεινόμενη μέθοδος παραγωγής πλέγματος, μπορεί να παρέχει ένα δομημένο υπολογιστικό χωρίο με απόλυτη πιστότητα στο φυσικό σχήμα. Επιπλέον, ο συνδυασμός της αποτελεσματικής μεθόδου παραγωγής πλέγματος με την προσομοίωση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων (με βάση μια Euler προσέγγιση), μπορεί να συμβάλει στην ερμηνεία της συμπεριφοράς των σωματιδίων κάτω από εξαιρετικά ασταθείς ροές στο αναπνευστικό σύστημα.

Η δομή της διατριβής είναι η ακόλουθη:

- Στο Κεφάλαιο 2, παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο που αφορά την δημιουργία δομημένου πλέγματος σε πολύπλοκες γεωμετρίες. Επιπλέον παρουσιάζεται, το θεωρητικό υπόβαθρο της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων και η προτεινόμενη μοντελοποίηση τους κατά Euler.
- Στο κεφάλαιο 3 παρουσιάζεται η εφαρμογή της μεθόδου γένεσης πλέγματος σε πολύπλοκες γεωμετρίες σε δύο ενδιαφέρουσες περιπτώσεις βιοϊατρικών εφαρμογών (το ανεύρυσμα κοιλιακής αορτής και τη λαγόνια διακλάδωση). Επιπλέον παρουσιάζεται η εφαρμογή της μεθόδου δημιουργίας πλέγματος και η προσομοίωση μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων, σε χρονικά μεταβαλλόμενη ροή υψηλής συχνότητας με εφαρμογή στον υψίσυχο ταλαντευτικό αερισμό.
- Τέλος, στο κεφάλαιο 4, συνοψίζονται τα κύρια συμπεράσματα της διατριβής και παρουσιάζονται μελλοντικές εφαρμογές και ενδεχόμενες βελτιώσεις των μεθόδων που αναπτύχθηκαν.

Θεωρία

2

2.1 Γένεση πλέγματος σε πολύπλοκες γεωμετρίες

Η αριθμητική επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων απαιτεί ένα διακριτοποιημένο χωρίο. Η χωρική διακριτοποίηση του υπολογιστικού χωρίου αποτελεί ένα σύνολο συνδεδεμένων σημείων που συχνά αναφέρεται ως πλέγμα. Οι τύποι πλέγματος μπορούν να χωριστούν σε δύο κύριες κατηγορίες, δομημένα και μη-δομημένα πλέγματα, ενώ η ανάμειξη των δύο αυτών τύπων παράγει μια τρίτη κατηγορία που αναφέρεται ως υβριδικό πλέγμα. Οι πιο κοινί τύποι των στοιχείων που χρησιμοποιούνται στην παραγωγή πλέγματος είναι τρίγωνα ή τετράπλευρα σε δυο διαστάσεις και τετράεδρα ή εξαέδρα σε τρεις διαστάσεις. Η χρήση των τετραέδρων αντιστοιχεί σε μη-δομημένο πλέγμα και η χρήση εξαέδρων τυπικά αναφέρεται σε δομημένο πλέγμα. Η χρήση των μη-δομημένων υπολογιστικών πλεγμάτων προτιμάται συχνά διότι δημιουργούνται εύκολα σε πολύπλοκες γεωμετρίες και ακολουθούν το γεωμετρικό σχήμα με πιστότητα. Ωστόσο, τα μη-δομημένα πλέγματα θεωρείται γενικά ότι παρέχουν λιγότερο ακριβείς λύσεις από τα δομημένα πλέγματα. Σειρά μελετών έδειξε ότι τα δομημένα πλέγματα που χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση της ροής σε πολύπλοκες γεωμετρίες είναι αποτελεσματικότερα από τα αντίστοιχα μη δομημένα [Weingarden V.I. 1994; Cifuentes A.O. and Kalbag. A 1992; Brewer M. et al. 2003; Longest, P. W. and Vinchurkar S .2007; Vinchurkar S. and Longest P.W. 2008]. Παρά το γεγονός ότι η υπεροχή του δομημένου πλέγματος είναι σαφής, μόνο λίγες υπολογιστικές μελέτες χρησιμοποιούν δομημένα πλέγματα για την μοντελοποίηση πολύπλοκων γεωμετριών.

Ένας από τους στόχους της παρούσας διατριβής είναι να εισαγάγει μια νέα μέθοδο που επιτρέπει τη δημιουργία δομημένων πλεγμάτων υψηλής ποιότητας και απλής τοπολογίας που αναπαράγουν πιστά την αρχική γεωμετρία.

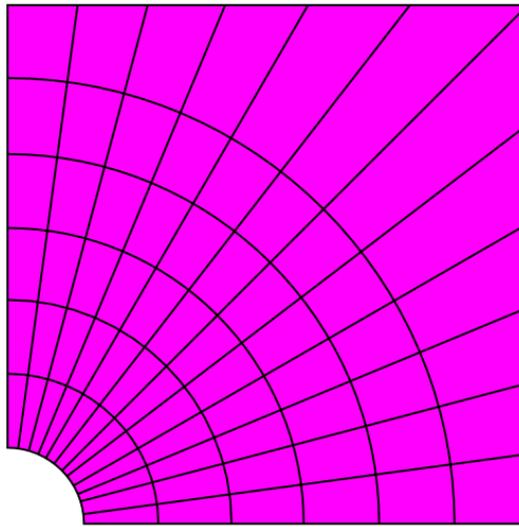
Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μια σύντομη αναφορά στη θεωρία γένεσης πλεγμάτων και παρουσιάζεται αναλυτικά η προτεινόμενη μέθοδος γένεσης δομημένου πλέγματος.

2.1.1 Θεωρία Γένεσης Πλέγματος

Σε αυτό το υποκεφάλαιο, περιγράφονται οι βασικές μέθοδοι γένεσης δομημένων και μη δομημένων πλεγμάτων.

Μέθοδοι γένεσης πλέγματος – Δομημένο πλέγμα

Ένα δομημένο πλέγμα χαρακτηρίζεται από σταθερή συνδεσιμότητα των στοιχείων του. Αυτό περιορίζει τις επιλογές στοιχείων σε τετράπλευρα για χωρία 2D ή σε εξαέδρα για χωρία 3D. Οι κόμβοι αυτών των πλεγμάτων ακολουθούν ένα επαναλαμβανόμενο μοτίβο όπου κάθε εσωτερικός κόμβος είναι πάντα συνδεδεμένος με ένα συγκεκριμένο αριθμό γειτονικών κόμβων, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.1.



Σχήμα 2.1: Ένα τυπικό δομημένο πλέγμα

Η παρουσία αυτού του μοτίβου σημαίνει ότι οι δομές δεδομένων που απαιτούνται για την αναπαράσταση του πλέγματος είναι τετριμμένες και οι γειτονικοί κόμβοι μπορούν εύκολα να αναγνωρίζονται με κάποια κατάλληλη αρίθμηση των κόμβων.

Οι κυρίαρχες ιδιότητες που θέλει κάποιος να έχει ένα δομημένο πλέγμα είναι η κατά το δυνατόν ορθογωνιότητα των πλεγματικών γραμμών και η πύκνωση τους σε σημεία με υπολογιστικό ενδιαφέρον. Υπάρχει μεγάλη ποικιλία μεθόδων γένεσης και βελτίωσης δομημένου πλέγματος, ωστόσο οι κυρίαρχες μέθοδοι μπορούν να κατηγοριοποιηθούν στις τρεις ακόλουθες κατηγορίες.

A) Αλγεβρικές μέθοδοι

Η γένεση πλεγμάτων με βάση αλγεβρικές μεθόδους βασίζεται στην δημιουργία του εσωτερικού πλέγματος με βάση κάποια παρεμβολή μεταξύ των επιφανειακών σημείων. Το κύριο πλεονέκτημα της μεθόδου είναι η ταχύτητα και η ευκολία εφαρμογής της. Συχνά οι αλγεβρικές μέθοδοι χρησιμοποιούνται για την κατασκευή ενός αρχικού πλέγματος που στη συνέχεια βελτιώνεται μέσω της επίλυσης μερικών διαφορικών εξισώσεων.

Η γνωστότερη και σημαντικότερη αλγεβρική μέθοδος γένεσης πλέγματος είναι η Transfinite interpolation (TFI) [Gordon W. N. and Hall C.A 1973]. Τα πλεονεκτήματα της συγκεκριμένης μεθόδου είναι ότι μπορεί να δημιουργήσει πλέγματα που ακολουθούν την εξωτερική επιφάνεια του χωρίου, μπορεί να ελεγχθεί η κατά τόπους πύκνωση των στοιχείων και επιπροσθέτως είναι υπολογιστικά “φθηνή” και εύκολα εφαρμόσιμη.

B) Μέθοδοι γένεσης πλέγματος με την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων

Η γένεση πλέγματος που βασίζεται στην επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων είναι η πιο ευρέως χρησιμοποιούμενη σήμερα για την δημιουργία και βελτίωση δομημένων πλεγμάτων. Οι διαφορικές εξισώσεις που χρησιμοποιούνται είναι συνήθως τύπου Laplace ή Poisson και η κεντρική ιδέα είναι η δημιουργία ενός πλέγματος μέσω της επίλυσης ενός συστήματος εξισώσεων όμοιου με την εξίσωση (2.1)

$$\begin{cases} \nabla^2 \xi = P \\ \nabla^2 \eta = Q \\ \nabla^2 \zeta = R \end{cases} \quad (2.1)$$

Όπου P, Q, R είναι συναρτήσεις ελέγχου που επηρεάζουν τις ιδιότητες του πλέγματος. Γενικά οι συναρτήσεις ελέγχου επηρεάζουν την ομαλότητα, την ορθογωνιότητα και την πύκνωση των πλεγματικών γραμμών. Ένα πλήθος μεθόδων δημιουργίας και βελτίωσης πλεγμάτων μέσω της επίλυσης μερικών διαφορικών εξισώσεων υπάρχει στην βιβλιογραφία [Thompson et al. 1985; 1999; Hansen et al. 2005; Kaul U.K. 2010].

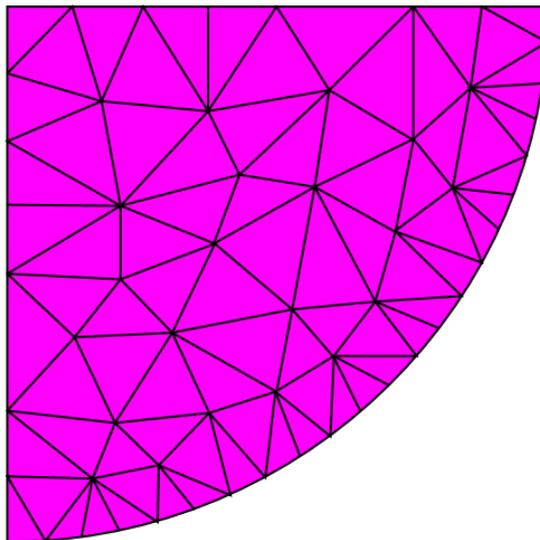
C) Μέθοδοι σύμμορφου μετασχηματισμού

Η γένεση πλέγματος με την χρήση μεθόδων σύμμορφου μετασχηματισμού συνήθως αφορά την δημιουργία επιφανειακών πλεγμάτων πάνω σε δοσμένες γεωμετρίες. Η κύρια ιδέα είναι ο υπολογισμός ενός μετασχηματισμού που αντιστοιχεί το πραγματικό χωρίο σε ένα ελεγχόμενο προκαθορισμένο χωρίο με τις επιθυμητές ιδιότητες. Οπότε με την χρήση του μετασχηματισμού ένα πλέγμα με τις επιθυμητές ιδιότητες μπορεί να δημιουργηθεί πάνω στο αρχικό χωρίο.

Η προτεινόμενη μέθοδος συνδυάζει βασικούς αλγόριθμους από τις δυο πρώτες κατηγορίες γένεσης πλέγματος και εισάγει μια νέα προσέγγιση στην εφαρμογή της μεθόδου σύμμορφου μετασχηματισμού πάνω σε τριγωνοποιημένα επιφανειακά χωρία.

Μέθοδοι γένεσης πλέγματος – Μη- Δομημένο πλέγμα

Σε αντίθεση με το δομημένο πλέγμα, το μη-δομημένο πλέγμα δεν ακολουθεί κάποιο καθορισμένο “μοτίβο” και οι γειτονικοί κόμβοι δεν μπορούν να αναγνωριστούν με κάποια αρίθμηση. Ένα παράδειγμα ενός μη-δομημένου πλέγματος φαίνεται στο σχήμα 2.2.



Σχήμα 2.2: Ένα τυπικό μη-δομημένο πλέγμα

Τα δεδομένα που χρειάζονται για την αναπαράσταση ενός μη-δομημένου πλέγματος είναι πιο πολύπλοκα και είναι αναγκαίο να υπάρχει μητρώο γειτνιάσεων μεταξύ των στοιχείων. Η ύπαρξη ενός τέτοιου μητρώου επηρεάζει την απόδοση των υπολογιστικών πράξεων επίλυσης των εξισώσεων και αυξάνει το υπολογιστικό κόστος.

Η γένεση μη-δομημένων πλεγμάτων συχνά βασίζεται σε ιδέες από την διαφορική γεωμετρία. Υπάρχουν πολλοί μέθοδοι δημιουργίας μη δομημένων πλεγμάτων με τις δυο κυρίαρχες να είναι η τριγωνοποίηση κατά Delaunay [Baker T.J. 1989] και η μέθοδος του προελαύνοντος μετώπου [Peraire J. et al. 1987]. Πολλές τεχνικές συνδυάζουν και τις δυο κυρίαρχες μεθόδους. Περισσότερες πληροφορίες μπορούν να αντληθούν από την βιβλιογραφία [Thompson et al. 1999].

2.1.2 Γένεση δομημένου πλέγματος από τριγωνικές επιφάνειες δεδομένων ιατρικής απεικόνισης

Η δημιουργία δομημένου πλέγματος ξεκινώντας από τριγωνοποιημένες επιφάνειες είναι ένα σημαντικό ζητούμενο για την επιστημονική κοινότητα των βιο-ρευστών. Οι δυο κυρίαρχοι λόγοι είναι, η αναγκαιότητα πιστής αναπαράστασης των ανθρώπινων γεωμετριών για την ανάπτυξη εξατομικευμένων μοντέλων ανά ασθενή και το γεγονός ότι το πιο συχνό αποτέλεσμα που δίνουν τα προγράμματα επεξεργασίας δεδομένων ιατρικής απεικόνισης είναι τριγωνοποιημένες επιφάνειες.

Για να αντιμετωπιστούν αυτές οι προκλήσεις έχει αναπτυχθεί πλήθος μελετών που δημιουργεί δομημένα πλέγματα υψηλής ποιότητας αλλά χωρίς πιστή αναπαράσταση των πραγματικών γεωμετριών των ανθρώπινων οργάνων. Χαρακτηριστικά σε μια πρόσφατη μελέτη [De Santis et al. 2010] σημειώνεται ότι μια μελλοντική εξέλιξη θα είναι η δημιουργία δομημένων πλεγμάτων με βάση πιο ακριβείς αναπαραστάσεις τις πραγματικής γεωμετρίας που θα προκύπτουν από τριγωνοποιημένες επιφανειακές γεωμετρίες (π.χ. επιφανειακά μοντέλα τύπου STL).

Ένα επιφανειακό μοντέλο τύπου STL είναι η πιο κοινή γεωμετρική αναπαράσταση πραγματικών γεωμετριών ανθρώπινων οργάνων που παράγεται από λογισμικά οπτικοποίησης και χειρισμού δεδομένων ιατρικής απεικόνισης. Το μοντέλο τύπου STL (διαδεδομένο στις αναπαραστάσεις στερεό-λιθογραφίας CAD) περιγράφει μια επιφάνεια με την χρήση τριγώνων ορισμένων σε ένα Καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων.

Στο παρελθόν οι Giannakoglou et al. [1996] πρότειναν έναν αριθμητικό αλγόριθμο που δημιουργεί επιφανειακά δομημένα πλέγματα ξεκινώντας από τριγωνικές γεωμετρικές αναπαραστάσεις. Επιπρόσθετα οι Gopalsamy et al. [2005] πρότειναν μια μέθοδο δημιουργίας δομημένου πλέγματος πάνω σε τριγωνοποιημένες επιφάνειες μέσω μετασχηματισμών. Συνολικά οι προαναφερόμενες μελέτες παρήγαγαν αξιοσημείωτα αποτελέσματα αλλά δεν κατέληξαν σε μια μέθοδο που θα παράγει ένα πλήρες δομημένο πλέγμα τριών διαστάσεων που να μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε υπολογιστικές εφαρμογές.

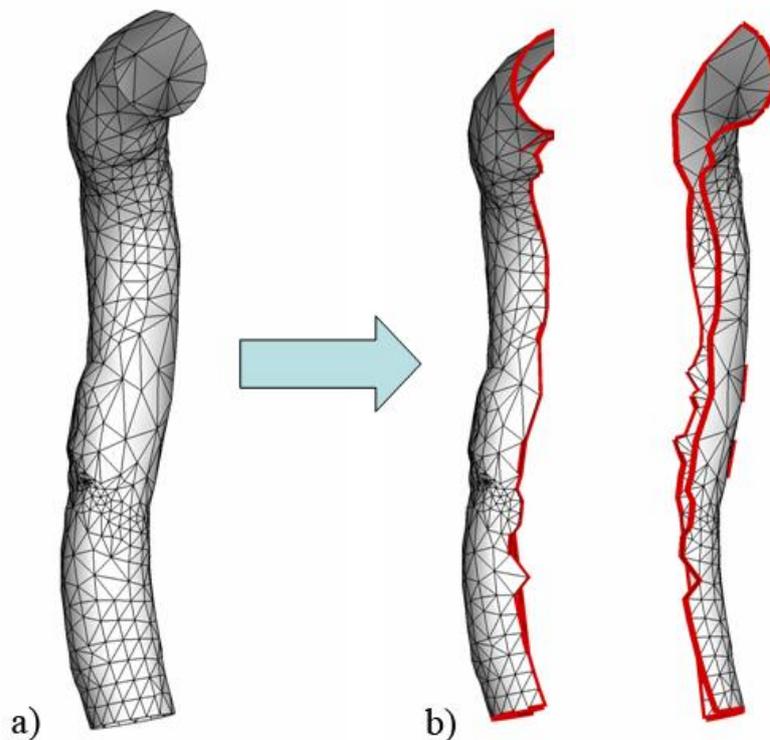
Η προτεινόμενη μέθοδος [Makris et al. 2012] καταφέρνει την δημιουργία δομημένου πλέγματος εντός πολύπλοκων γεωμετριών έχοντας σαν αφετηρία τριγωνοποιημένες επιφάνειες. Ο κύριος σκοπός της μεθόδου είναι η ανάπτυξη ενός υπολογιστικού εργαλείου που θα δημιουργεί μοντέλα εξατομικευμένης πρόβλεψης πάνω σε πραγματικές γεωμετρίες ασθενών ξεκινώντας από δεδομένα ιατρικής απεικόνισης. Η διαδικασία αποτελείται από την δημιουργία ενός επιφανειακού δομημένου πλέγματος πάνω σε πολύπλοκες γεωμετρίες και στη συνέχεια την δημιουργία και την βελτίωση του εσωτερικού πλέγματος μέσω ιδιοκατασκευασμένων λογισμικών γένεσης πλέγματος.

Η διαδικασία γένεσης πλέγματος αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

- Διαχωρισμός των τριγωνοποιημένων επιφανειών σε δυο χωρία.
- Γένεση δομημένου πλέγματος ξεχωριστά σε κάθε τριγωνοποιημένο χωρίο.
- Επανάωση των δυο ξεχωριστών χωρίων.
- Δημιουργία μιας περιοχής πύκνωσης των πλεγματικών γραμμών κοντά στα τοιχώματα.
- Δημιουργία του εσωτερικού πλέγματος.
- Βελτίωση του πλέγματος σύμφωνα με τις ανάγκες του φυσικού προβλήματος.

Διαχωρισμός των τριγωνοποιημένων επιφανειών σε δυο χωρία..

Η προτεινόμενη μέθοδος είναι αρχικά εφαρμόσιμη μόνο σε ανοιχτά χωρία, όμως οι τριγωνοποιημένες επιφάνειες που αναπαριστούν πραγματικές ανθρώπινες γεωμετρίες είναι συνήθως κλειστά χωρία. Για αυτό το λόγο οι τριγωνοποιημένες επιφάνειες πρέπει να διαχωριστούν σε δυο ανοιχτά χωρία. Η διαδικασία φαίνεται στην περίπτωση της γεωμετρίας μιας ανθρώπινης αρτηρίας στο σχήμα 2.3.

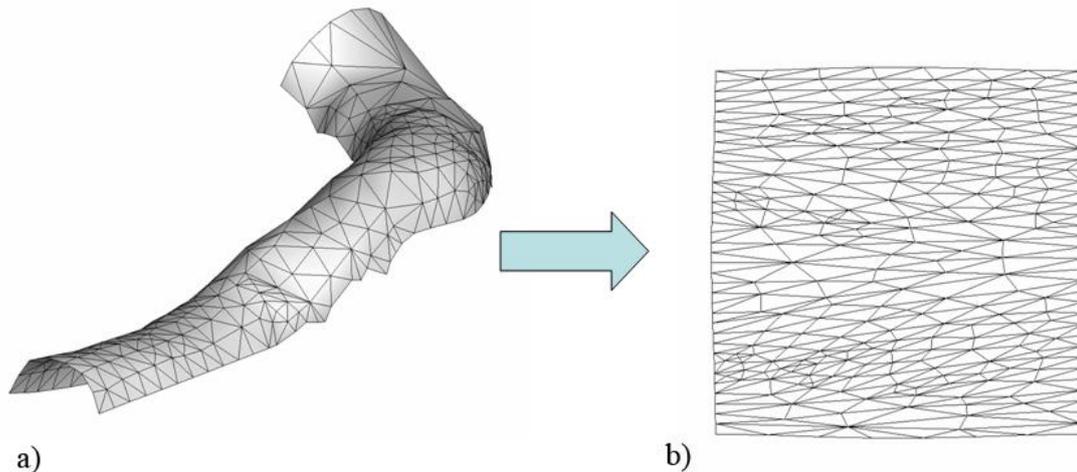


Σχήμα 2.3: a) Η τριγωνοποιημένη επιφάνεια μιας γεωμετρίας ανθρώπινης αρτηρίας b) Οι δυο διαχωρισμένες επιφάνειες

Δημιουργία του επιφανειακού δομημένου πλέγματος.

Η δημιουργία του δομημένου επιφανειακού πλέγματος γίνεται ξεχωριστά σε κάθε χωρίο. Το πρώτο βήμα σε αυτήν την διαδικασία είναι η δημιουργία μιας ισόμορφης παραμετροποίησης για τριγωνικές επιφάνειες ακολουθώντας την θεωρία του Floater [1997]. Με την εφαρμογή της θεωρίας του Floater σε μια 3D

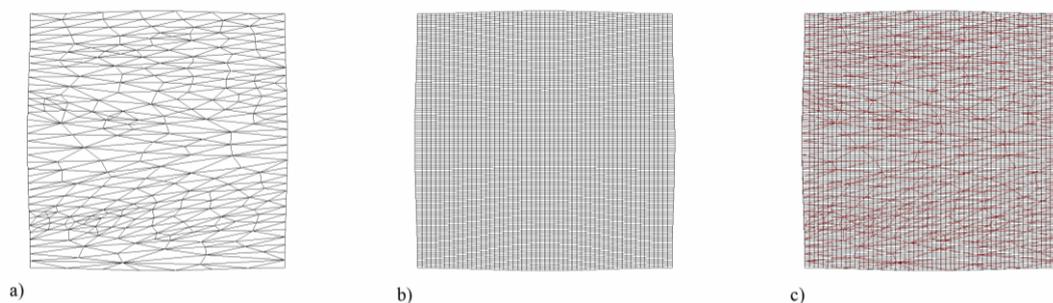
επιφανειακή τριγωνοποίηση στο χώρο R^3 προκύπτει μια επίπεδη τριγωνοποίηση εντός ενός $2D$ προκαθορισμένου χωρίου με αντιστοιχία ένα προς ένα μεταξύ σημείων και πλευρών. Αυτό γίνεται με την επίλυση ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων που εκφράζουν την διατήρηση ενός παράγοντα κυρτού συνδυασμού υπολογισμένου για κάθε σημείο στο χώρο R^3 , προσαρμοσμένο στο νέο χωρίο $2D$. Στο σχήμα 2.4, μια επιφανειακή τριγωνοποίηση και η αντίστοιχη επίπεδη που προέκυψε από τον αλγόριθμο παρουσιάζονται. Περισσότερες λεπτομέρειες για τον αλγόριθμο μπορούν να βρεθούν στο κύριο κομμάτι (στην Αγγλική γλώσσα) της παρούσας διατριβής.



Σχήμα 2.4: a) Η τριγωνοποιημένη επιφάνεια b) Η επιφανειακή τριγωνοποίηση που προέκυψε από την εφαρμογή του αλγορίθμου.

Το δεύτερο βήμα της διαδικασίας είναι η χρήση μιας ισόμορφης αντιστοίχισης για την δημιουργία του δομημένου επιφανειακού πλέγματος. Για αυτό το σκοπό ακολουθούνται τα παρακάτω βήματα:

- Ένα επίπεδο δομημένο πλέγμα παρεμβάλλεται στην επίπεδη τριγωνοποίηση όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.5.



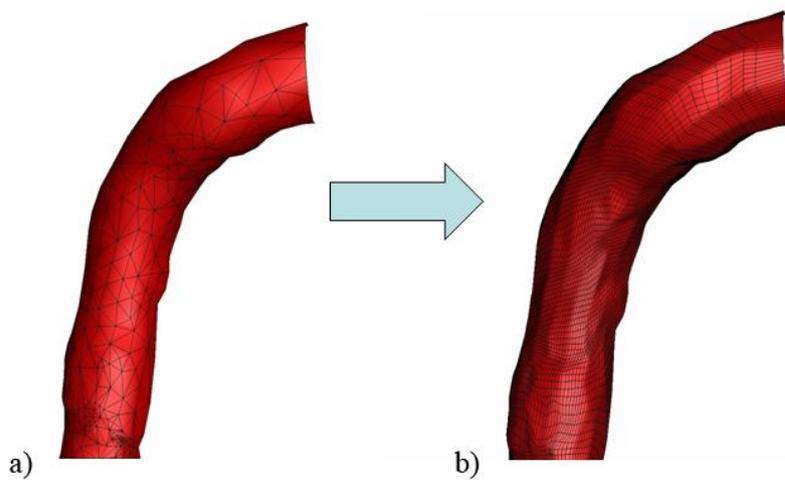
Σχήμα 2.5: a) Η επίπεδη τριγωνοποίηση b) Το επίπεδο δομημένο πλέγμα c) Η υπέρθεση του δομημένου πλέγματος στην επίπεδη τριγωνοποίηση

- Γίνεται ο καθορισμός σε ποιο τρίγωνο ανήκει κάθε σημείο του δομημένου πλέγματος με βάση την εργασία του Moller [1998].

- Υπολογίζονται οι βαρυκεντρικές συντεταγμένες κάθε σημείου του δομημένου πλέγματος με βάση τις κορυφές του αντίστοιχου τριγώνου όπως έχει περιγράψει από τους Floater et al. [2005].
- Το $2D$ δομημένο πλέγμα μετατρέπεται σε επιφανειακό $3D$ δομημένο πλέγμα με την χρήση του αναλλοίωτου των βαρυκεντρικών συντεταγμένων που υπολογίστηκαν στις δυο διαστάσεις.

Λόγω του ισόμορφου μετασχηματισμού, οι βαρυκεντρικές συντεταγμένες παραμένουν αναλλοίωτες και στην επιφανειακή και στην $3D$ τριγωνοποίηση. Με βάση αυτή την πληροφορία και με έναν απλό μετασχηματισμό παράγεται ένα επιφανειακό δομημένο πλέγμα πάνω από την $3D$ τριγωνοποιημένη επιφάνεια. Στο σχήμα 2.6 παρουσιάζεται το επιφανειακό δομημένο πλέγμα και η αρχική τριγωνοποιημένη επιφάνεια.

Ο αριθμός των στοιχείων του δομημένου πλέγματος είναι ο ίδιος με τον αριθμό των στοιχείων που αρχικά προβάλαμε πάνω στην επιφανειακή τριγωνοποίηση. Με αυτόν τον τρόπο ο έλεγχος του αριθμού των πλεγματικών στοιχείων γίνεται μέσω του καθορισμού του αριθμού των στοιχείων που προβάλλουμε.



Σχήμα 2.6: a) Η αρχική τριγωνοποιημένη επιφάνεια b) Το αρχικό επιφανειακό δομημένο πλέγμα

Επανάθεση των δυο ξεχωριστών χωρίων.

Αφού δημιουργηθεί το επιφανειακό δομημένο πλέγμα στα δυο χωριστά χωρία αυτά ενώνονται όπως φαίνεται στο σχήμα 2.7 και το συνολικό επιφανειακό πλέγμα χρησιμοποιείται για την δημιουργία του εσωτερικού πλέγματος.



Σχήμα 2.7: Η ένωση των δυο επιφανειακών δομημένων πλεγμάτων

Δημιουργία μιας περιοχής πύκνωσης των πλεγματικών γραμμών κοντά στα τοιχώματα.

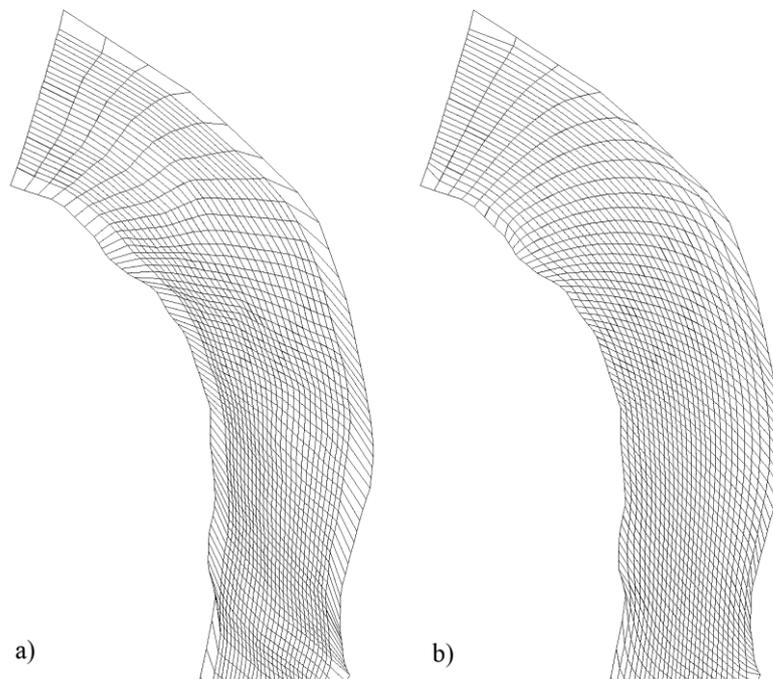
Με βάση τις διευθύνσεις των κανονικών διανυσμάτων των σημείων του δομημένου πλέγματος και με προβολή σημείων προς το εσωτερικό του σχήματος δημιουργείται μια περιοχή πύκνωσης των πλεγματικών στοιχείων κοντά στο τοίχωμα.

Δημιουργία ενός αρχικού εσωτερικού πλέγματος.

Το επόμενο βήμα είναι η δημιουργία του εσωτερικού πλέγματος με την χρήση αλγεβρικών μεθόδων δημιουργίας πλέγματος [Gordon W. N. and Hall C.A.1973]. Το αποτέλεσμα της διαδικασίας είναι ένα δομημένο πλέγμα πολλαπλών χωρίων με δυνατότητα ελέγχου της πύκνωσης των πλεγματικών στοιχείων κοντά στο τοίχωμα.

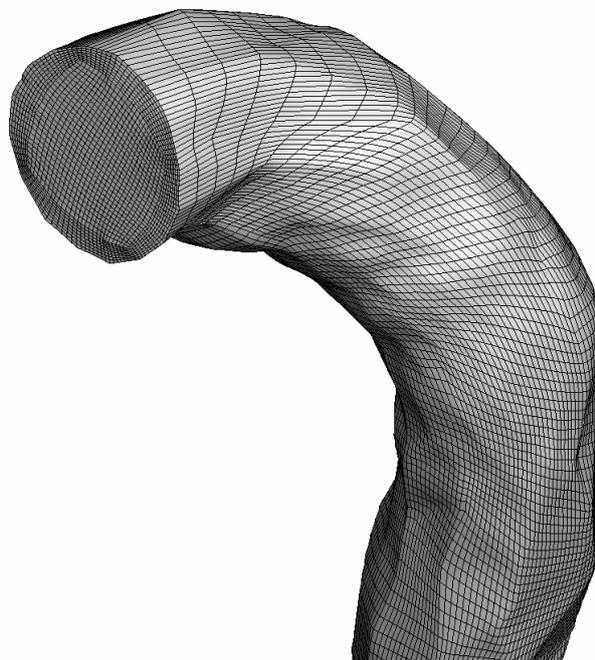
Βελτίωση του πλέγματος με βάση τις ανάγκες του φυσικού προβλήματος.

Ακολουθεί η βελτίωση του πλέγματος με βάση τις ανάγκες του φυσικού προβλήματος και απόλυτο σεβασμό στο αρχικό σχήμα. Η βελτίωση γίνεται από έναν ιδιοκατεσκευασμένο κώδικα που βασίζεται στην επίλυση ελλειπτικών ΜΔΕ όπως περιγράφεται στην βιβλιογραφία [Thompshon et al. 1999]. Στο σχήμα 2.8 φαίνεται ένα εσωτερικό επίπεδο του πλέγματος πριν και μετά την εφαρμογή της βελτίωσης.



Σχήμα 2.8: a) Ένα επίπεδο από το εσωτερικό του πλέγματος b) Το ίδιο επίπεδο μετά από την διαδικασία βελτίωσης πλέγματος

Το αποτέλεσμα της μεθοδολογίας είναι το δομημένο πλέγμα πολλαπλών χωρίων που απεικονίζεται στο σχήμα 2.9. Το πλέγμα ταυτίζεται με την αρχική επιφάνεια και δίνεται η δυνατότητα για βελτίωση του και τοπική πύκνωση σε περιοχές κοντά στο τοίχωμα.



Σχήμα 2.9: Το δομημένο πλέγμα που δημιουργήθηκε από την μέθοδο για μια πραγματική γεωμετρία ανθρώπινης αρτηρίας.

2.1.3 Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο 2.1 παρουσιάστηκε μια σύντομη αναφορά στις μεθόδους γένεσης πλέγματος και μια εκτενής αναφορά την προτεινόμενης μεθόδου για την δημιουργία δομημένου πλέγματος σε τριγωνικές επιφάνειες που προέκυψαν από δεδομένα ιατρικής απεικόνισης.

Συνολικά η παρούσα μέθοδος είναι ένα βήμα προς την ανάπτυξη εξατομικευμένων προσομοιώσεων βιο-ρευστων, λόγω της πιστής αναπαραγωγής των γεωμετριών των ανθρώπινων οργάνων συνδυασμένη με την δημιουργία υψηλής ποιότητας πλέγματος που επιτρέπει την επίλυση ΜΔΕ με ακρίβεια, ταχύτητα και πιστότητα.

2.2 Μεταφορά και εναπόθεση Σωματιδίων

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο σχετικά με τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε ροές αερολύματος και τα αριθμητικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται. Ως αερόλυμα ορίζεται μια αιωρούμενη διασπορά μικρών στερεών ή υγρών εντός ρευστού μέσου, συνήθως αέρα. Ένα αερόλυμα είναι ένα σύστημα δύο φάσεων με μία συνεχή φάση και μία διεσπαρμένη φάση, που ονομάζεται σωματοδιακή φάση. Η σωματοδιακή φάση μπορεί να είναι στερεή ή υγρή. Οι εξισώσεις που διέπουν την κίνηση της συνεχούς φάσης θεωρείται τετριμμένες και επομένως παρουσιάζονται εν συντομία, ενώ το μοντέλο προσομοίωσης μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων που αναπτύχθηκε περιγράφεται λεπτομερώς.

2.2.1 Συνεχής φάση

Κυρίαρχες εξισώσεις

Για τον υπολογισμό του πεδίου ροής της συνεχούς φάσης επιλύεται υπολογιστικά η χρονικά μεταβαλλόμενη εξίσωση Navier – Stokes για ασυμπύεστο ρευστό με την χρήση της τεχνικής των πεπερασμένων όγκων. Η εξίσωση (2.2) εκφράζει την διατήρηση της μάζας σε ένα ασυμπύεστο ρευστό ενώ η εξίσωση (2.3) εκφράζει την διατήρηση της ορμής σε περιπτώσεις χρονικά μεταβαλλόμενων ροών, με τ να είναι ο τανυστής τάσης, \vec{U} η ταχύτητα και p η πίεση του ρευστού.

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} \otimes \vec{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \quad (2.3)$$

Υπολογιστική επίλυση

Η χρονικά μεταβαλλόμενη εξίσωση Navier – Stokes για ασυμπύεστο ρευστό επιλύεται υπολογιστικά με την χρήση του εμπορικού λογισμικού Ansys CFX®.

2.2.2 Διακριτή φάση

Γενικές παρατηρήσεις

Το μέγεθος των αερολυμάτων εκτείνεται σε πολλές τάξεις μεγέθους, από μερικά νανόμετρα ($1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$) μέχρι αρκετά μικρόμετρα ($1\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m}$). Με βάση την διάμετρο τους τα αερολύματα κατηγοριοποιούνται σε βαριά ($dp > 1\mu\text{m}$) και λεπτά ($dp < 1\mu\text{m}$), επιπροσθέτως μια κατηγοριοποίηση που χρησιμοποιείται συχνά είναι αυτή των νανοσωματιδίων ($dp < 50$ ή 100nm).

Στο προτεινόμενο μοντέλο μεταφοράς και εναπόθεσης αερολύματος ένας Eulerian φορμαλισμός προτείνεται για την επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς σωματιδίων (Particle Transport Equation - P.T.E.) . Οι προσεγγίσεις τύπου Euler παρουσιάζουν σημαντικά πλεονεκτήματα σε σχέση με τις συχνά χρησιμοποιούμενες προσεγγίσεις τύπου Lagrange [Pitou et al. 2011].

Στο προτεινόμενο μοντέλο οι πληθυσμοί σωματιδίων θεωρούνται ίδιων διαστάσεων (μονοδιασπαρμένοι). Επιπρόσθετα επειδή για τις διφασικές ροές που θα εξεταστούν η σωματιδιακή φάση είναι πολύ αραιή σε σχέση με το ρευστό (ο όγκος των σωματιδίων δεν ξεπερνά το 0.0001% του συνολικού όγκου) θεωρούμε μονόπλευρη σύζευξη. Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την μέθοδο δίνονται στην συνέχεια.

Κυρίαρχες εξισώσεις

Υπάρχουν δύο κατηγορίες διαδικασιών που μεταβάλουν την κατανομή μεγέθους ενός αερολύματος: α) οι εσωτερικές διαδικασίες, όπως η συσσωμάτωση/συνάθροιση και η μετατροπή αέριας φάσης σε σωματιδιακή, και β) οι εξωτερικές διαδικασίες, όπως η συναγωγή, η διάχυση και η επίδραση εξωτερικών δυνάμεων (π.χ. βαρύτητας, ηλεκτρομαγνητικής). Η εξίσωση που περιγράφει την επίδραση αυτών των φαινομένων στην κατανομή μεγέθους σωματιδίων ονομάζεται Γενική Δυναμική Εξίσωση (General Dynamic Equation - GDE). Με τις κατάλληλες συνοριακές και οριακές συνθήκες η GDE περιγράφει πλήρως την κατανομή μεγέθους σωματιδίων σε ροές αερολύματος.

Εντός ροής ρευστού η GDE γράφεται ως [Drossinos and Housiadas 2006]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\vec{u}_p) = \left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{growth} + \left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{coag} \quad (2.4)$$

Όπου c είναι η συγκέντρωση σωματιδίων και \vec{u}_p είναι η ταχύτητα των σωματιδίων.

Στην εξίσωση (2.4), ο πρώτος όρος της αριστερής πλευράς αναφέρεται στην χρονική συσσώρευση σωματιδίων και ο δεύτερος στην μεταφορά σωματιδίων λόγω εξωτερικών διεργασιών, η δεξιά πλευρά της εξίσωσης αναπαριστά τις εσωτερικές διεργασίες των σωματιδίων.

Το προτεινόμενο μοντέλο βασίζεται στην Γενική Δυναμική Εξίσωση (2.4) και δίνεται ιδιαίτερη βαρύτητα στην μεταφορά και εναπόθεση των σωματιδίων με ταυτόχρονη απλοποίηση των όρων εσωτερικών διεργασιών. Με βάση αυτήν την προσέγγιση η εξίσωση (2.4) γίνεται η εξίσωση (2.5) γνωστή και ως εξίσωση μεταφοράς σωματιδίων (Particle Transport Equation - P.T.E.).

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\vec{u}_p) = 0 \quad (2.5)$$

Το προτεινόμενο μοντέλο είναι η επέκταση ενός ήδη ανεπτυγμένου μοντέλου από τους Pitou et al. [2011;2013] για την επίλυση χρονικά μεταβαλλόμενων ροών. Το χαρακτηριστικό της προσέγγισης είναι ότι μπορεί να προσδιοριστεί η ταχύτητα σωματιδίου \vec{u}_p χωρίς την επίλυση της εξίσωσης της ορμής των σωματιδίων.

Θεωρούμε μια διφασική ροή ενός συστήματος αερολύματος, όπου τα σωματίδια είναι η διακριτή φάση εντός μιας συνεχούς φάσης (ρευστό). Λόγω της χαμηλής κατά όγκο συγκέντρωσης της διακριτής φάσης, τα σωματίδια δεν επηρεάζουν την κίνηση της συνεχούς φάσης και δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους μέσω

εσωτερικών διαδικασιών. Σε μια διφασική προσέγγιση του αερολύματος η μέση σωματιδιακή ταχύτητα \vec{u}_p δίνεται από την εξίσωση της σωματιδιακής ορμής που βάση των Fernandez de la Mora και Rosner [1982] μπορεί να γραφτεί ως :

$$\frac{\partial \vec{u}_p}{\partial t} + \vec{u}_p \cdot \nabla \vec{u}_p = \frac{1}{c} \nabla \cdot \Pi_p + \vec{F}_{fluid} \quad (2.6)$$

Όπου \vec{F}_{fluid} είναι η δύναμη ανά μονάδα μάζας που ασκείται στα σωματίδια από το ρευστό και Π_p είναι ο τανυστής τάσης των σωματιδίων.

Βασιζόμενοι στην προσέγγιση της σωματιδιακής φάσης ως ιδανικό αέριο σε ισόθερμη ροή υιοθετούμε την γενική έκφραση για πεδία δυνάμεων στην περίπτωση Brownian σωματιδίων όπως περιγράφει από τον Ramshaw[1979] και αναπτύχθηκε περαιτέρω από τους Pilou et al.[2011]

Η εξίσωση ορμής εκφράζεται ως:

$$\frac{\partial \vec{u}_p}{\partial t} + \vec{u}_p \cdot \nabla \vec{u}_p = -\frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c + \frac{1}{\tau_p} (\vec{u}_f - \vec{u}_p) \quad (2.7)$$

όπου T_f είναι η σταθερή θερμοκρασία του ρευστού, m_p η μάζα ενός σωματιδίου, K_B η σταθερά Boltzmann, \vec{u}_f η ταχύτητα του ρευστού και τ_p ο χρόνος χαλάρωσης του σωματιδίου. Ο χρόνος σωματιδιακής χαλάρωσης είναι μια παράμετρος που χαρακτηρίζει την απόκριση των σωματιδίων στις μεταβολές του πεδίου ροής και ορίζεται ως τον χρόνο που χρειάζεται ένα σωματίδιο διαμέτρου d_p και πυκνότητας ρ_p για να αποκτήσει την τελική του ταχύτητα αν τοποθετηθεί σε ένα ακίνητο ρευστό ιξώδους μ_f . [Drossinos and Housiadas 2006].

Στη συνέχεια γίνεται ένα ανάπτυγμα της εξίσωσης ορμής των σωματιδίων στο όριο των μικρών χρόνων χαλάρωσης

$$\vec{u}_p = \vec{u}_p^{(0)} + \tau_p \vec{u}_p^{(1)} \quad (2.8)$$

Όπως προτάθηκε από τους Fernandez de la Mora και Rosner [1982].

Η εξίσωση της ορμής (2.7) μπορεί να πολλαπλασιαστεί με τον χρόνο χαλάρωσης του σωματιδίου τ_p και να εκφραστεί σαν την εξίσωση (2.9):

$$\begin{aligned} \tau_p \left[\frac{\partial \vec{u}_p^{(0)}}{\partial t} + \tau_p \frac{\partial \vec{u}_p^{(1)}}{\partial t} \right] + \tau_p [(\vec{u}_p^{(0)} + \tau_p \vec{u}_p^{(1)}) \cdot \nabla (\vec{u}_p^{(0)} + \tau_p \vec{u}_p^{(1)})] = \\ = \vec{u}_f - \vec{u}_p^{(0)} - \tau_p \vec{u}_p^{(1)} - \tau_p \frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \end{aligned} \quad (2.9)$$

Η εξίσωση (2.9) μπορεί να γραφτεί αναλυτικά:

$$\begin{aligned} & \tau_p \left[\frac{\partial \bar{u}_p^{(0)}}{\partial t} + \tau_p \frac{\partial \bar{u}_p^{(1)}}{\partial t} \right] + \tau_p [(\bar{u}_p^{(0)} \cdot \nabla) \bar{u}_p^{(0)} + \tau_p^2 (\bar{u}_p^{(1)} \cdot \nabla) \bar{u}_p^{(1)} + (\bar{u}_p^{(0)} \cdot \nabla) \tau_p \bar{u}_p^{(1)} + (\tau_p \bar{u}_p^{(1)} \cdot \nabla) \bar{u}_p^{(0)}] = \\ & = \bar{u}_f - \bar{u}_p^{(0)} - \tau_p \bar{u}_p^{(1)} - \tau_p \frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \end{aligned} \quad (2.10)$$

Αγνοώντας τους όρους του χρόνου χαλάρωσης σωματιδίων $2^{\text{ης}}$ και ανώτερης τάξης έχουμε:

$$\bar{u}_p^{(0)} = \bar{u}_f \quad (2.11)$$

και

$$\bar{u}_p^{(1)} = -\frac{\partial \bar{u}_f}{\partial t} - (\bar{u}_p^{(0)} \cdot \nabla) \bar{u}_p^{(0)} - \frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \quad (2.12)$$

Οπότε η ταχύτητα σωματιδίων γίνεται ίση με:

$$\bar{u}_p = \bar{u}_f + \tau_p \left[-\frac{\partial \bar{u}_f}{\partial t} - (\bar{u}_f \cdot \nabla) \bar{u}_f - \frac{K_B T_f}{m_p} \nabla \ln c \right] \quad (2.13)$$

Η ταχύτητα σωματιδίων \bar{u}_p διαχωρίζεται σε δυο μέρη: ένα μέρος που εκφράζει την διάχυση και εξαρτάται από την συγκέντρωση των σωματιδίων και ένα μέρος που εκφράζει την συναγωγή των σωματιδίων (εξίσωση (2.14)) και είναι ανεξάρτητο της συγκέντρωσης.

$$\bar{u}_c = \bar{u}_f + \tau_p \left[-\frac{\partial \bar{u}_f}{\partial t} - (\bar{u}_f \cdot \nabla) \bar{u}_f \right] \quad (2.14)$$

Η εξίσωση διατήρησης της μάζας της σωματιδιακής φάσης (2.5) παίρνει την μορφή:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot [c(\bar{u}_c - D \nabla \ln c)] = 0 \quad (2) \quad (2.15)$$

όπου $D = \tau_p \frac{K_B T_f}{m_p}$ είναι ο συντελεστής διάχυσης των σωματιδίων που δίνεται από την εξίσωση Stokes-

Einstein. Η εξίσωση (2.15) μπορεί να γραφτεί με την μορφή της εξίσωσης (2.16) επειδή $c \nabla \ln c = \nabla c$.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \left[c \left(\bar{u}_f - \tau_p \frac{\partial \bar{u}_f}{\partial t} - \tau_p (\bar{u}_f \cdot \nabla) \bar{u}_f \right) \right] = \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (2.16)$$

Η εξίσωση (2.16) είναι η επέκταση της εξίσωσης μεταφοράς σωματιδίων που ενσωματώνει και τα φαινόμενα συναγωγής, διάχυσης και αδράνειας σωματιδίων. Η εξίσωση (2.16) μπορεί με την χρήση του θεωρήματος Gauss να εκφραστεί σε ολοκληρωτική και αδιάστατη μορφή σαν την εξίσωση (2.17).

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \int_s c \bar{u}_c \cdot d\vec{S} = Pe^{-1} \int_s \nabla c \cdot d\vec{S} \quad (2.17)$$

όπου Pe είναι ο αριθμός Péclet που εκφράζει το κλάσμα της ροής συναγωγής με την ροή διάχυσης των σωματιδίων και ισούται με:

$$Pe = \frac{d_t u_0}{D}$$

όπου d_t είναι ένα χαρακτηριστικό μέγεθος της ροής και u_0 είναι η χαρακτηριστική ταχύτητα που χρησιμοποιείται και για την αδιαστατοποίηση των μεγεθών. Μεγαλύτερα σωματίδια με μικρό συντελεστή διάχυσης θα έχουν υψηλότερο αριθμό Pe και όσο ο αριθμός Pe αυξάνει η ροή συναγωγής γίνεται σημαντικότερη από την διάχυση και αντιστρόφως.

Υπολογιστική επίλυση

Αφού το πεδίο ροής του ρευστού υπολογιστεί από το Ansys CFX, η ταχύτητα συναγωγής των σωματιδίων \vec{u}_c υπολογίζεται από την εξίσωση (2.14) και εν συνεχεία η εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων επιλύεται και μας δίνει την σωματιδιακή συγκέντρωση.

Για αυτό το λόγω η εξίσωση (2.17) λύνεται σε 3 διαστάσεις με την χρήση της μεθόδου των πεπερασμένων όγκων και με ομόθετη διάταξη μεταβλητών, η οποία λαμβάνει υπόψη τη μη ορθογωνιότητα του πλέγματος και είναι κατάλληλη για πλέγματα πολλαπλών χωρίων.

Για την χρονική διακριτοποίηση του όρου της σωματιδιακής συγκέντρωσης χρησιμοποιείται ένα σχήμα εμπρός Euler. Συγκεκριμένα η χρονική παράγωγος της σωματιδιακής συγκέντρωσης δίνεται από την εξίσωση (2.18).

$$\frac{\partial c_{n+1}}{\partial t} = \frac{c_{n+1} - c_n}{dt} \quad (2.18)$$

Σε ότι αφορά τις συνοριακές συνθήκες του τοιχώματος, γίνεται χρήση της συνθήκης του απολύτως απορροφητικού τοιχώματος που περιγράφεται από την εξίσωση (2.19)

$$c|_{wall} = 0 \quad (2.19)$$

Η οποία κοντά στο τοίχωμα μας δίνει μια (αδιάστατη) ροή διάχυσης σωματιδίων, $J^D|_{wall}$, ίση με:

$$J^D|_{wall} = -Pe^{-1} \int_s \nabla c \cdot \vec{dS}|_{wall} \quad (2.20)$$

Επιπλέον, υπάρχει μια μη μηδενική ροή συναγωγής σωματιδίων κοντά στο τοίχωμα που δίνει μια (αδιάσταση) ροή συναγωγής σωματιδίων, $J^C|_{wall}$, που μπορεί να εκφραστεί ως:

$$J^C|_{wall} = 0 \quad \text{εάν} \quad \vec{u}_c \cdot \vec{dS}|_{wall} \leq 0 \quad (2.21)$$

$$J^C|_{wall} = \int_s c \vec{u}_c \cdot \vec{dS}|_{wall} \quad \text{εάν} \quad \vec{u}_c \cdot \vec{dS}|_{wall} > 0 \quad (2.22)$$

Όπου η ταχύτητα συναγωγής σωματιδίων, \vec{u}_c υπολογίζεται ακριβώς πριν το τοίχωμα (στον πλησιέστερο υπολογιστικό κόμβο). Οι δυο ροές εναπόθεσης σωματιδίων μας δίνουν μια συνολική ροή εναπόθεσης που εκφράζεται από την εξίσωση (2.23):

$$J_{dep} = J^C|_{wall} + J^D|_{wall} \quad (2.23)$$

2.2.3 Πιστοποίηση μεθόδου

Πιστοποίηση όρων αδράνειας και εξωτερικών δυνάμεων

Η Πιστοποίηση της ενσωμάτωσης των όρων αδράνειας και εξωτερικών δυνάμεων στο μοντέλο έχει ήδη γίνει [Pitou et al. 2011] στο πρόσφατο παρελθόν. Τα αποτελέσματα έχουν συγκριθεί με πειραματικά [Pui et al. 1987], αναλυτικά [Cheng Y. and Wang C. 1975] και διαφορετικά υπολογιστικά μοντέλα [Tsai C.J. and Pui D. 1990] με βάση τον υπολογισμό του κλάσματος εναπόθεσης σωματιδίων. Επιπρόσθετα από τους [Pitou et al. 2013] πιστοποιήθηκαν τα αποτελέσματα του μοντέλου σε περιπτώσεις που υπάρχουν εξωτερικές δυνάμεις (μαγνητικό πεδίο) και τα αποτελέσματα κρίθηκαν ικανοποιητικά. Με βάση τις προαναφερόμενες μελέτες η προσομοίωση των αδρανειακών όρων από το μοντέλο κρίνεται επαρκής για να προσομοιώσουν περιπτώσεις μεταφοράς και εναπόθεσης αδρανειακών σωματιδίων.

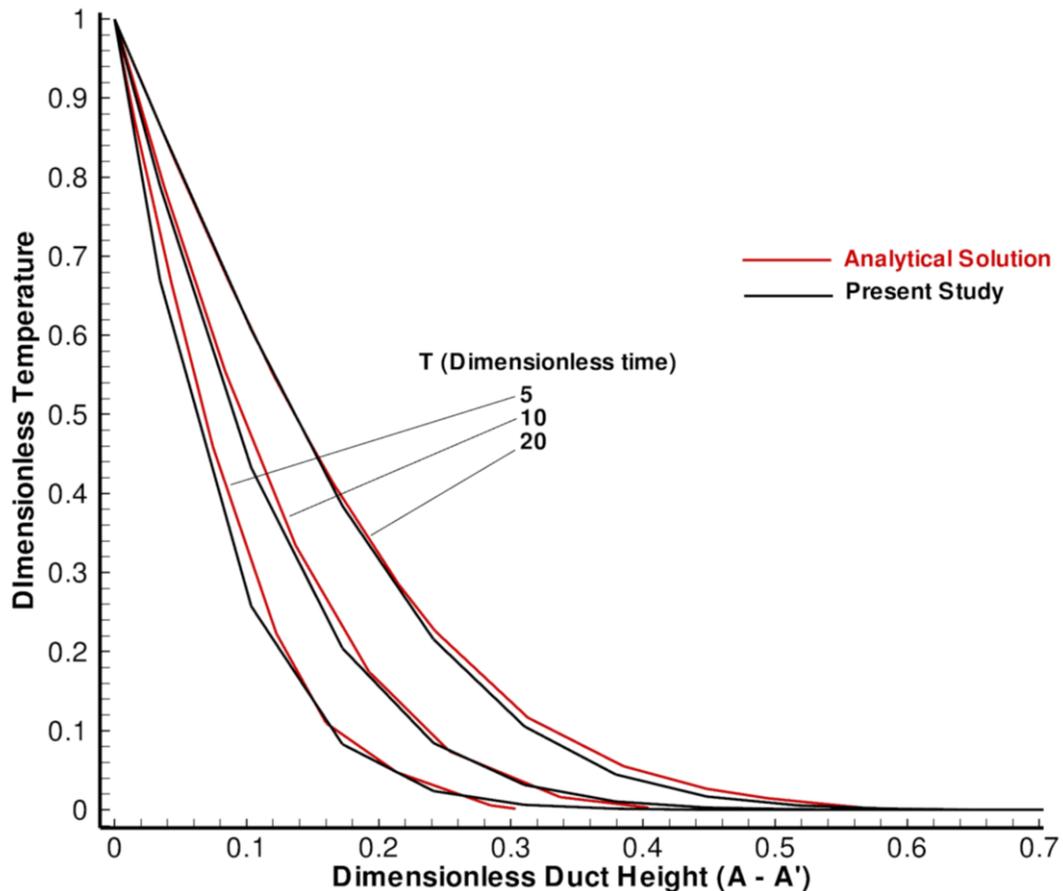
Πιστοποίηση χρονικά μεταβαλλόμενων όρων

Όπως προαναφέρθηκε το μοντέλο αναπτύχθηκε περαιτέρω ώστε να προσομοιώνει χρονικά μεταβαλλόμενες ροές, οπότε χρειάστηκε η πιστοποίηση των νέο εισαγόμενων όρων. Η πιστοποίηση των νέων όρων έγινε μέσω της σύγκρισης με ένα πρόβλημα που έχει αναλυτική λύση.

Οι Siegel και Sparrow [1959] ανέλυσαν την μεταβαλλόμενη στρωτή ροή θερμότητας στην είσοδο ενός αγωγού απείρου μήκους (παραλλήλων πλακών) του οποίου τα τοιχώματα βρίσκονταν υπό συνεχή θερμική ροή. Η ταχύτητα του ρευστού θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη και σταθερή.

Το μοντέλο που αναπτύχθηκε για την προσομοίωση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων χρησιμοποιήθηκε για να προσομοιώσει εξαναγκασμένη συναγωγή θερμότητας στην είσοδο αγωγών απείρου μήκους και τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με την προαναφερόμενη μελέτη. Η αναπαραγωγή του προβλήματος έγινε θεωρώντας ότι τα σωματίδια έχουν μηδενικό μέγεθος.

Στο σχήμα 2.10 παρουσιάζεται η σύγκριση για διαφορετικά (αδιάστατα) χρονικά βήματα. Η συμφωνία των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με τα αντίστοιχα αναλυτικά κρίνεται ως πολύ καλή.



Σχήμα 2.10: Σύγκριση υπολογιστικής και αναλυτικής λύσης για διαφορετικά χρονικά βήματα.

Συμπερασματικά, αυτή η σύγκριση δείχνει ότι η ενσωμάτωση των νέων όρων για την προσομοίωση χρονικά μεταβαλλόμενων ροών είναι δόκιμη και το μοντέλο κρίνεται ικανό να χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων σε χρονικά μεταβαλλόμενες ροές.

2.2.4 Συμπεράσματα

Σε αυτό το υποκεφάλαιο παρουσιάστηκε σύντομα μια εισαγωγή σχετικά με την μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων και αναλυτικά η προσέγγιση που υιοθέτησε η παρούσα διατριβή.

Στο μοντέλο που αναπτύχθηκε η σωματιδιακή φάση δεν επηρεάζει την κίνηση του ρευστού (μόνοπλευρη σύζευξη). Επίσης λαμβάνονται υπόψη οι εσωτερικές διαδικασίες του αερολύματος και θεωρείται ότι η σωματιδιακή φάση συμπεριφέρεται σαν ιδανικό αέριο. Επιπρόσθετα υιοθετήθηκε η προσέγγιση του χαμηλού χρόνου χαλάρωσης σωματιδίων που προτάθηκε από τους Fernandez de la Mora and Rosner [1982] για να προσομοιωθούν τα φαινόμενα αδράνειας και διάχυσης των σωματιδίων.

Αποδείχθηκε ότι η ταχύτητα των σωματιδίων μπορεί να διαχωριστεί σε δυο μέρη a) ένα μέρος που εκφράζει την διάχυση και εξαρτάται από την βαθμίδα της συγκέντρωσης των σωματιδίων και b) ένα μέρος που εκφράζει

την συναγωγή και τα αδρανειακά φαινόμενα των σωματιδίων και εξαρτάται μόνο από την ταχύτητα του ρευστού.

Έτσι με την ενσωμάτωση της ταχύτητας των σωματιδίων στην εξίσωση διατήρησης της μάζας των σωματιδίων προκύπτει μια εξίσωση μεταφοράς σωματιδίων που εκφράζει ταυτόχρονα την διάχυση και την αδράνεια των σωματιδίων χρησιμοποιώντας έναν Eulerian φορμαλισμό.

Το προτεινόμενο μοντέλο υιοθετεί μια πλήρως Eulerian (για ρευστό και για σωματίδια). Τα πλεονεκτήματα της Eulerian προσέγγισης σε συνδυασμό με την ταυτόχρονη προσομοίωση αδρανειακών και διαχυτικών φαινομένων των σωματιδίων παρέχει ένα ισχυρό εργαλείο υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και δυναμικής σωματιδίων που μπορεί να προσομοιώσει χρονικά μεταβαλλόμενες ροές σωματιδίων.

Εφαρμογές

3

3.1 Ένα εξατομικευμένο μοντέλο Ανευρύσματος Κοιλιακής Αορτής (ΑΚΑ)

Στην παρούσα εφαρμογή παρουσιάζεται η δημιουργία ενός δομημένου πλέγματος πολλαπλών χωρίων σε γεωμετρία Ανευρύσματος Κοιλιακής Αορτής (ΑΚΑ) από δεδομένα ιατρικής απεικόνισης (DICOM). Η γένεση πλέγματος γίνεται με την χρήση της προτεινόμενης μεθοδολογίας και το αποτέλεσμα είναι ένα πλέγμα που προσφέρει πιστή αναπαράσταση της αρχικής γεωμετρίας με αναπαραγωγή των λεπτομερειών στο σχήμα του ανευρύσματος που μπορούν να μεταβάλουν το πεδίο ροής, τις τάσεις στο τοίχωμα και τελικά την πιθανότητα ρήξης ανευρύσματος.

3.1.1 Εξατομικευμένες πραγματικές γεωμετρίες και γένεση πλέγματος

Η δημιουργία ενός εξατομικευμένου μοντέλου με βάση ένα πραγματικό σχήμα ανθρώπινου οργάνου περιγράφεται για την περίπτωση του ΑΚΑ και αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

- Επεξεργασία των δεδομένων ιατρικής απεικόνισης και εξαγωγή του προς μελέτη σχήματος.
- Δημιουργία μιας 3D επιφάνειας από το πρόγραμμα επεξεργασίας ιατρικών δεδομένων.
- Δημιουργία και βελτίωση δομημένου πλέγματος πάνω στο πραγματικό σχήμα του ΑΚΑ.

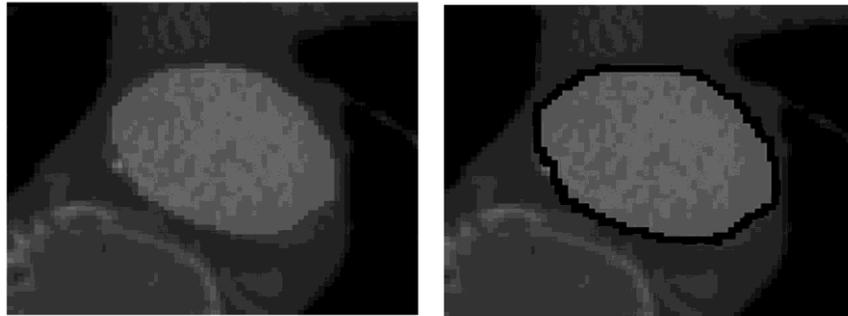
Επεξεργασία των δεδομένων ιατρικής απεικόνισης και εξαγωγή του προς μελέτη σχήματος – Δημιουργία μιας 3D επιφάνειας

Το πρώτο βήμα της μεθοδολογίας είναι η ανάγνωση ενός αρχείου δεδομένων ιατρικής απεικόνισης (DICOM). Σήμερα σχεδόν όλες οι ιατρικές μέθοδοι απεικόνισης (μαγνητική τομογραφία (MRI), αξονική τομογραφία (CT), υπερηχογράφημα (MU) κλπ.) και τα ιατρικά μηχανήματα απεικόνισης εξάγουν τα αποτελέσματά τους σε μορφή DICOM. Ένα αρχείο DICOM αποτελείται από ένα σύνολο επίπεδων εικόνων διατομών του ανθρώπινου σώματος. Η ανοικοδόμηση της πραγματικής γεωμετρίας από δεδομένα τύπου DICOM θεωρείται μια υπόθεση ρουτίνας και γίνεται από σειρά ιδιοκατασκευασμένων κωδίκων ή εμπορικό λογισμικό. Σε αυτή τη μελέτη χρησιμοποιείται η εξαιρετικά αποτελεσματική και αξιόπιστη σουίτα λογισμικού ανοιχτού κώδικα 3DSlicer® [Pieper et al. 2006]. Για την μελέτη της περίπτωσης του ΑΚΑ, ανώνυμα δεδομένα ελήφθησαν από τις βάσεις δεδομένων του Ιατρικού Διαγνωστικού Κέντρου: ΕΓΚΕΦΑΛΟΣ - Euromedica.

Ένα σημαντικό βήμα στη διαδικασία της ανακατασκευής της εικόνας είναι η επιλογή του όγκου ενδιαφέροντος (πραγματικό σχήμα ΑΚΑ). Λόγω της ετερογενούς φύσης της κατανομής της έντασης του σήματος και της ποιότητας των εικόνων DICOM, η διαδικασία αυτή δεν μπορεί να αυτοματοποιηθεί. Πάντοτε απαιτείται ένας ορισμένος βαθμός παρέμβασης του χρήστη κατά την ανακατασκευή, κυρίως για την αναγνώριση των ορίων του σχήματος.

Στην περίπτωση του ΑΚΑ, πολλές μελέτες εξετάζουν μεθόδους για την επιλογή του πραγματικού σχήματος όταν υπάρχει παρουσία θρόμβου [Lee et al. 2010]. Ο θρόμβος αναπτύσσεται στο εσωτερικό αγγειακό τοίχωμα.

Ετσι, ο οπτικός διαχωρισμός μεταξύ θρόμβου και εξωτερικού αγγειακού τοιχώματος του ΑΚΑ είναι απαραίτητος. Λόγω της διαφοράς στη βιοχημική σύνθεση, ο θρόμβος παράγει διαφορετικό οπτικό αποτέλεσμα στα αρχεία τύπου DICOM. Ως εκ τούτου, χρησιμοποιώντας κατώφλια φωταύγειας είναι δυνατόν να γίνει διάκριση του εσωτερικού θρόμβου από το αγγειακό τοίχωμα του ΑΚΑ. Στην εφαρμογή αυτή γίνεται η επιλογή μόνο του εσωτερικού τμήματος του ΑΚΑ, χωρίς το θρόμβο, καθώς αυτή είναι η περιοχή όπου αναπτύσσεται το πεδίο ροής. Στο Σχήμα 3.1 φαίνεται η επιλογή του εσωτερικού τμήματος ενός ΑΚΑ χρησιμοποιώντας τα κατώτατα όρια φωταύγεια. Για καλύτερο οπτικό αποτέλεσμα, μία γραμμή στα όρια της επιλεγμένης περιοχής έχει ζωγραφιστεί.



Σχήμα 3.1: (Αριστερά) Μια τυπική εικόνα δεδομένων DICOM από ιατρική απεικόνιση μια περίπτωσης ΑΚΑ. (Δεξιά) Η ίδια εικόνα με την περιοχή ενδιαφέροντος εντός περιγράμματος.

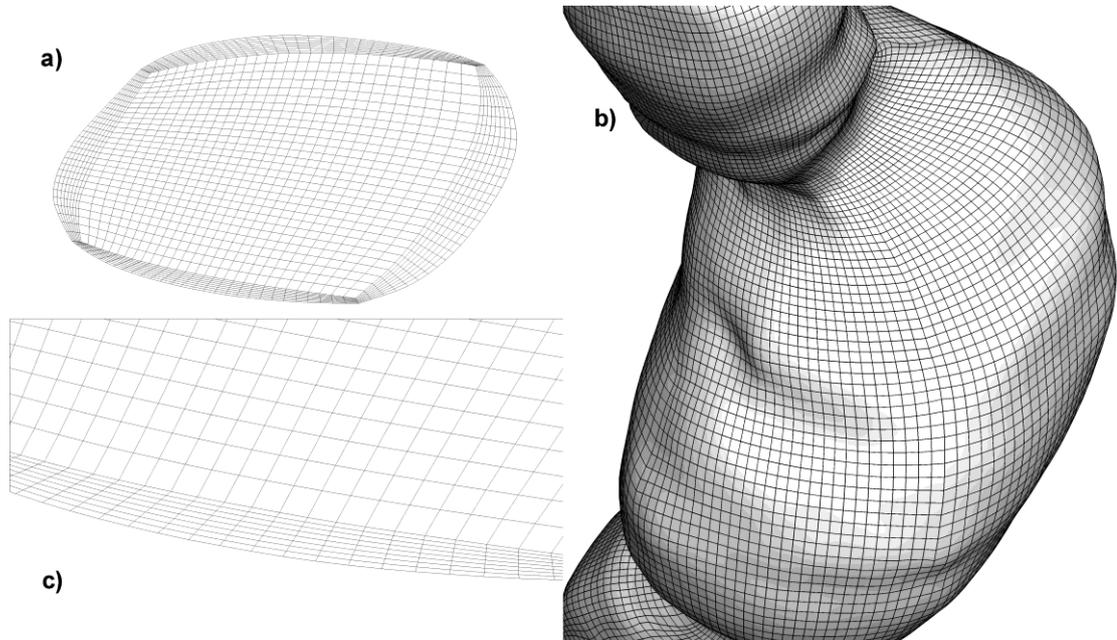
Μετά την κατάτμηση του όγκου του ενδιαφέροντος, το λογισμικό 3DSlicer® παράγει μια 3D επιφάνεια με συνδυασμό των δεδομένων των επίπεδων εικόνων. Το αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας εξάγεται σαν ένα αρχείο STL που περιγράφει το εξωτερικό κέλυφος του σχήματος με τη χρήση τριγώνων. Το αρχείο STL που χρησιμοποιείται για την μελέτη του ΑΚΑ είναι ορατό στο σχήμα 3.2.



Σχήμα 3.2: Η εικόνα του ΑΚΑ σε τύπο δεδομένων STL.

Δημιουργία πλέγματος

Χρησιμοποιώντας την μέθοδο που περιγράφεται αναλυτικά σε προηγούμενο κεφάλαιο αυτής της διατριβής δημιουργήθηκε και βελτιώθηκε ένα δομημένο πλέγμα πολλαπλών χωρίων με απόλυτη πιστότητα πάνω στο σχήμα του ΑΚΑ. Το αποτέλεσμα της μεθόδου είναι το πλέγμα που φαίνεται στο σχήμα 3.3. Το πλέγμα αναπαριστά με απόλυτη πιστότητα την αρχική επιφάνεια και παρέχει τοπική πύκνωση στοιχείων κοντά στο τοίχωμα του ΑΚΑ.



Σχήμα 3.3 : (α) Ένα επίπεδο από το εσωτερικό του δομημένου πλέγματος του ΑΚΑ (β) Λεπτομέρεια από την εξωτερική επιφάνεια του ίδιου χωρίου (γ) Λεπτομέρεια από το εσωτερικό επίπεδο του χωρίου.

Για το υπολογιστικό χωρίο του σχήματος 3.3, υπολογίστηκε ένας παράγοντας ποιότητας πλέγματος γνωστός και ως “μετρική στρέβλωσης”. Η μετρική στρέβλωσης ορίζεται από την εξίσωση (3.1) και υπολογίζεται για κάθε εξαεδρικό στοιχείο.

$$SKM = \max\left(\frac{\theta_{\max} - 90}{90}, \frac{90 - \theta_{\min}}{90}\right) \quad (3.1)$$

Στην εξίσωση (3.1), θ_{\max} είναι η μέγιστη γωνία και θ_{\min} η ελάχιστη γωνία κάθε εξαεδρικού στοιχείου. Η τιμή 0.0 ανταποκρίνεται σε ένα απολύτως ορθογώνιο στοιχείο ενώ η τιμή 1.0 σε ένα απολύτως στρεβλωμένο στοιχείο. Στον πίνακα 3.1 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για το συγκεκριμένο παράδειγμα και για ένα πλέγμα που αποτελείται από 316.651 στοιχεία με μια απόσταση πύκνωσης κοντά στο τοίχωμα ίση με 2,5 % της διαμέτρου του ΑΚΑ.

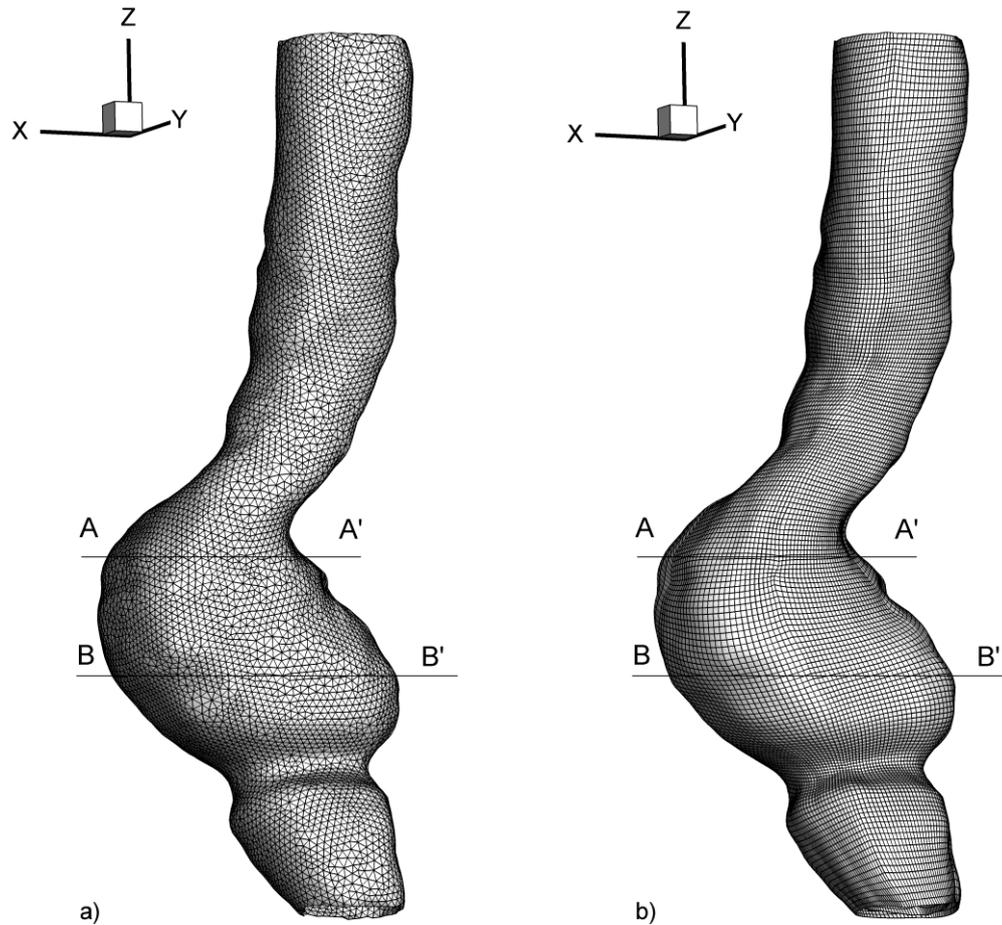
Μετρική στρέβλωσης	Αριθμός στοιχείων	Ποσοστό %
0.0 - 0.25 (Άριστο)	224845	71,00
0.25 - 0.50 (Καλό)	89226	28,19
0.50 - 0.75 (Μέτριο)	2580	0,81
0.75 - 1.00 (Αδύναμο)	0	0,00
Άθροισμα	316651	100,00

Πίνακας 3.1: Μετρική στρέβλωσης για το πλέγμα του ΑΚΑ.

Τα αποτελέσματα κατηγοριοποιούνται σε τέσσερις κατηγορίες με βάση μια εμπειρική κατηγοριοποίηση. Το πλέγμα που δημιουργήθηκε είναι ένα υψηλής ποιότητας πλέγμα με την πλειοψηφία των στοιχείων να χαρακτηρίζονται ως “άριστα” και σχεδόν κανένα στοιχείο κάτω από την κατηγορία “καλά”. Η υψηλή ποιότητα του παραγόμενου πλέγματος, η ευθυγράμμιση των στοιχείων με την κύρια διεύθυνση της ροής σε συνδυασμό με την ικανότητα των στοιχείων να πληθαίνουν πλησίον του τοιχώματος, εξασφαλίζει ότι η χρήση του πλέγματος που δημιουργήθηκε από την προτεινόμενη μεθοδολογία μπορεί να παρέχει ακριβή υπολογιστικά αποτελέσματα, ιδιαίτερα κοντά στο αρτηριακό τοίχωμα.

3.1.2 Αποτελέσματα από την προσομοίωση ροής αίματος εντός του ΑΚΑ

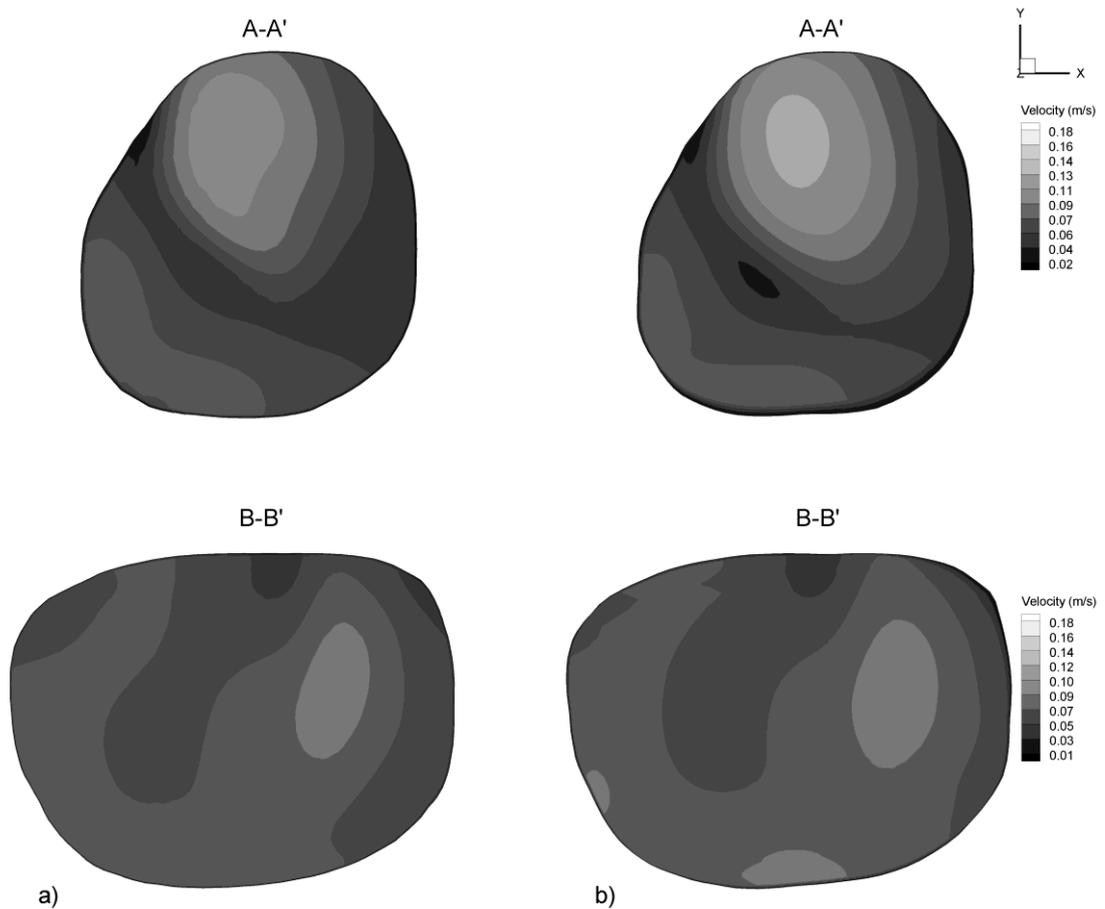
Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζεται μια σύντομη σύγκριση των αποτελεσμάτων, της προσομοίωσης ροής αίματος στο εσωτερικό του ΑΚΑ, χρησιμοποιώντας ένα δομημένο πλέγμα που δημιουργείται από την προτεινόμενη μεθοδολογία και ένα μη δομημένο πλέγμα που παράγεται από το εμπορικό λογισμικό ANSYS ICEM CFD ®. Το μη δομημένο πλέγμα δημιουργήθηκε με την μέθοδο του προελαύνοντος μετώπου και αποτελείται από 362,602 τετραεδρικά στοιχεία. Ενώ το δομημένο πλέγμα που παράγεται από την προτεινόμενη μεθοδολογία, αποτελείται από 316,651 εξαεδρικά στοιχεία. Τα υπολογιστικά χωρία που έχουν χρησιμοποιηθεί στην προσομοίωση της ροής του αίματος στο εσωτερικό του ΑΚΑ παρουσιάζονται στο σχήμα 3.4. Στην αριστερή πλευρά του σχήματος 3.4 παρουσιάζεται το μη δομημένο πλέγμα, ενώ στη δεξιά πλευρά του σχήματος παρουσιάζεται το δομημένο πλέγμα που παράγεται από την προτεινόμενη μεθοδολογία.



Σχήμα 3.4 : (a) Το μη δομημένο πλέγμα του ΑΚΑ που δημιουργήθηκε από το λογισμικό Ansys ICEM CFD® (b) Το δομημένο πλέγμα του ΑΚΑ που δημιουργήθηκε από την προτεινόμενη μέθοδο.

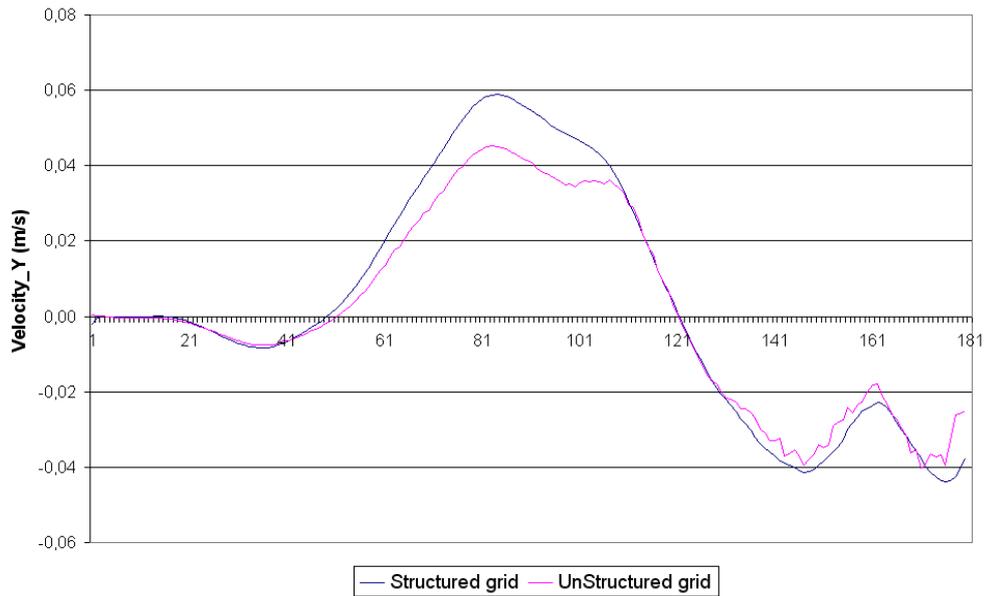
Η ροή του αίματος θεωρήθηκε σαν μια σταθερή ροή που αντιστοιχεί στην μέγιστη ταχύτητα εισροής της συστολικής φάσης του καρδιακού κύκλου [Li και Kleinstreuer 2007]. Το πεδίο ροής υπολογίζεται από το λογισμικό Ansys CFX® και το αίμα θεωρείται ασυμπύεστο, ομοιογενές και Νευτώνειο ρευστό. Η εκτέλεση των προσομοιώσεων και για τα δυο πλέγματα προέβλεψε μια κατανομή ταχύτητας και πίεσης σε φυσιολογικό εύρος και τα αποτελέσματα αντιστοιχούν με τις αναμενόμενες τιμές που έχουν αναφερθεί σε προηγούμενες μελέτες [Li και Kleinstreuer 2007].

Για να απεικονιστούν οι διαφορές των υπολογιζόμενων πεδίων ροής των δύο πλεγμάτων, δύο επίπεδα τμήματα εμφανίζονται στο σχήμα 3.5, ένα στην επάνω περιοχή και ένα στο μέσο του ανευρύσματος. Στην αριστερή πλευρά του σχήματος 3.5 παρουσιάζονται τα δύο επίπεδα τμήματα που προέρχονται από το μη δομημένο πλέγμα. Στη δεξιά πλευρά παρουσιάζονται τα ίδια επίπεδα τμήματα από το δομημένο πλέγμα. Χρησιμοποιείται ένα σύνολο κατανομών της ταχύτητας για να γίνουν ορατές οι διαφορές μεταξύ των δυο υπολογιζόμενων πεδίων ροής. Μια οπτική σύγκριση μεταξύ των μέτρων των ταχυτήτων των δύο διαφορετικών τύπων πλέγματος, υποδηλώνει ότι η χρήση του δομημένου πλέγματος παράγει λεπτομερέστερα πεδία ροής.

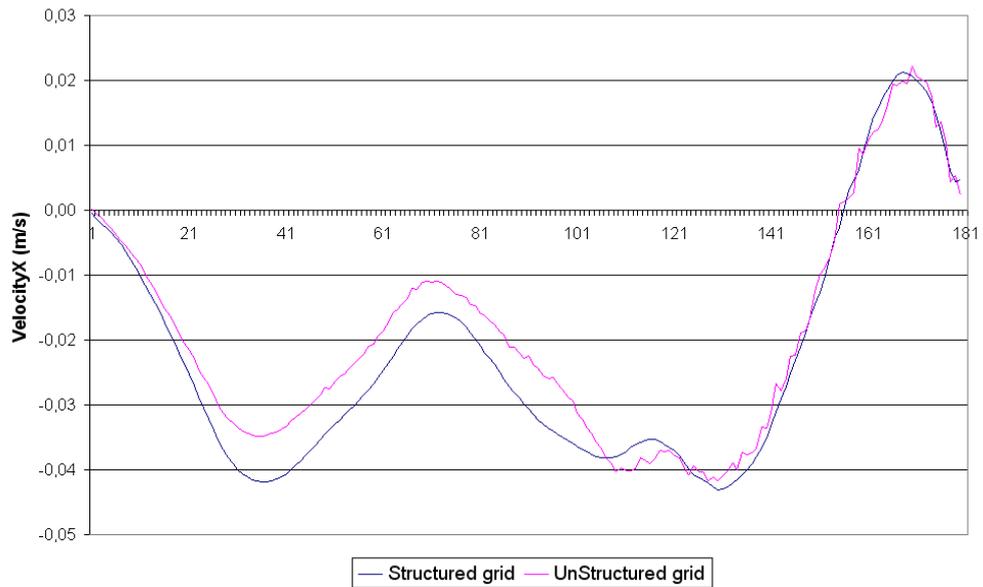


Σχήμα 3.5: (a) Δυο εσωτερικά επίπεδα του μη δομημένου πλέγματος του ΑΚΑ με τις κατανομές της ταχύτητας. (b) Δυο εσωτερικά επίπεδα του δομημένου πλέγματος του ΑΚΑ με τις κατανομές της ταχύτητας.

Για να ποσοτικοποιηθεί η διαφορά των πεδίων ροής που αναπτύχθηκαν στο εσωτερικό των δύο διαφορετικών υπολογιστικών χωρίων γίνεται μία σχετική μέτρηση σφάλματος. Για την εκτίμηση του σχετικού σφάλματος επιλέγεται μία γραμμή που αποτελείται από 180 σημεία πλησίον του αγγειακού άξονα και συγκρίνονται οι τιμές των ταχυτήτων για τα δυο πλέγματα. Τα αποτελέσματα των συντεταγμένων X και Y της ταχύτητας απεικονίζονται στα σχήματα 3.6 και 3.7 ως γραφήματα. Αξίζει να σημειωθεί ότι η κύρια διεύθυνση της ροής είναι προς τον άξονα Z. Οι δύο συντεταγμένες X και Y επιλέχθηκαν ώστε να μην είναι συμπίπτουν με την κυρίαρχη κατεύθυνση ροής προκειμένου να εκτιμηθεί καλύτερα η ικανότητα των υπολογιστικών πλεγμάτων να προσομοιώσουν τις δευτερεύουσες ροές.



Σχήμα 3.6 : Η συνιστώσα Y της ταχύτητας υπολογισμένη σε 180 σημεία και για τα δυο πλέγματα.



Σχήμα 3.7 : Η συνιστώσα X της ταχύτητας υπολογισμένη σε 180 σημεία και για τα δυο πλέγματα.

Με βάση τα δύο διαγράμματα που να πούμε ότι η χρήση του δομημένου πλέγματος παράγει πιο λεία και πιο φυσικά πεδία ροής. Το μη δομημένο πλέγμα παρουσιάζει ενδείξεις υψηλή αριθμητική στρέβλωσης με την εμφάνιση σγουρών γραμμών και τραχέων μεταβάσεων ταχυτήτων ανάμεσα σε γειτονικά γεωμετρικά σημεία. Επιπλέον, το μη δομημένο πλέγμα υπολογίζει τις δευτερεύουσες συντεταγμένες της ταχύτητα (Velocity_X και Velocity_Y) με μικρότερο μέτρο. Τα γεγονότα αυτά οδηγούν στο συμπέρασμα ότι το δομημένο πλέγμα να είναι πιο ακριβές στην προσομοίωση των δευτερευουσών ροών και εμφανίζει περισσότερες δευτερεύουσες δίνες μέσα στο πεδίο ροής. Επιπλέον, το αποτέλεσμα την υποεκτίμηση των δευτερευουσών ταχυτήτων από τη χρήση μη δομημένου πλέγματος, μπορεί να οδηγήσει σε υπολογισμό χαμηλότερης πίεσης στο τοίχωμα και υποεκτίμηση της πιθανότητας ρήξης.

Παρά το γεγονός ότι έγινε μια σύντομη σύγκριση μεταξύ των δύο τύπων πλέγματος, οι παρατηρούμενες διαφορές και τα αποτελέσματα που προέκυψαν είναι σε συμφωνία με τα συμπεράσματα που αναφέρθηκαν από προηγούμενες μελέτες σύγκρισης των δυο τύπων πλεγμάτων [Longest W. and Vinchurkar 2007 ; Vinchurkar and Longest W. 2008]. Συμπερασματικά το δομημένο πλέγμα παρέχει πιο ακριβής υπολογισμούς πεδίου ροής σε πλέγματα παρόμοιου πλήθους στοιχείων.

3.1.4 Συμπεράσματα

Σε μια περίπτωση ΑΚΑ, η γεωμετρία διαμορφώνεται σε απρόβλεπτο σχήμα που μπορεί να επηρεάσει το πεδίο ροής και τον κίνδυνο ρήξης του ανευρύσματος. Πολλές προηγούμενες υπολογιστικές μελέτες ανακατασκευάζαν το σχήμα ενός ΑΚΑ με βάση στατιστικά δεδομένα ή τιμές που έχουν μετρηθεί από ιατρικές εξετάσεις. Αυτές οι μελέτες έχουν το μειονεκτήματα της εξαφάνισης των μικρών λεπτομερειών στο τελικό σχήμα του ΑΚΑ. Άλλες υπολογιστικές μελέτες χρησιμοποίησαν ένα μη δομημένο υπολογιστικό πλέγμα για να προσομοιώσουν την περίπτωση του ΑΚΑ, αποδεχόμενες τους περιορισμούς των μη δομημένων πλεγμάτων.

Σε αυτή την εφαρμογή μια αποτελεσματική υπολογιστική τεχνική εφαρμόστηκε για την δημιουργία μιας λεπτομερούς ανακατασκευής του σχήματος και ενός δομημένου πλέγματος σε μια περίπτωση ενός ασθενή με ΑΚΑ , χρησιμοποιώντας DICOM δεδομένα που λαμβάνονται από ιατρική εξέταση απεικόνισης.

Ξεκινώντας από ένα σύνολο επιπέδων εικόνων που λαμβάνονται από μια εξέταση ιατρική απεικόνισης, ένα τρισδιάστατο σχήμα ανακατασκευάστηκε με τη χρήση του λογισμικού 3DSlicer®. Από αυτό το σχήμα δημιουργήθηκε ένα δομημένο υπολογιστικό πλέγμα πολλαπλών χωρίων με δυνατότητα ελέγχου της πυκνωσης κοντά στα τοιχώματα, το οποίο είναι σύμφωνο με την επιφάνεια. Το δομημένο πλέγμα που δημιουργήθηκε χρησιμοποιήθηκε για τη μελέτη του πεδίου ροής σε ΑΚΑ, με στόχο τον υπολογισμό της διατημητικής τάση τοιχώματος (WSS) και την σύγκριση των αποτελεσμάτων με ένα μη δομημένο πλέγμα αντίστοιχου πλήθους στοιχείων.

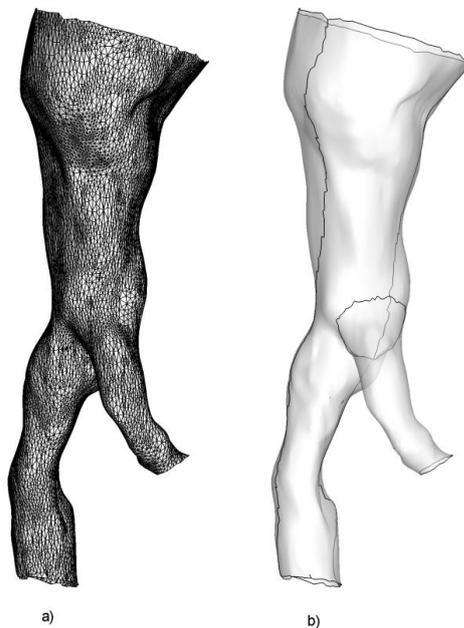
3.2 Γένεση πλέγματος σε μια εξατομικευμένη πραγματική γεωμετρία διακλάδωσης από δεδομένα ιατρικής απεικόνισης

Στην εφαρμογή παρουσιάζεται η γένεση δομημένου υπολογιστικού πλέγματος για γεωμετρία διακλάδωσης από δεδομένα ιατρικής απεικόνισης. Για την αξιολόγηση του παραγόμενου πλέγματος, εκτελούνται συγκρίσεις μεταξύ του πλέγματος που παράγεται από την προτεινόμενη μέθοδο και σειρά μη δομημένων πλεγμάτων που παράγονται από εμπορικό λογισμικό

3.2.1 Εξατομικευμένη πραγματική γεωμετρία διακλάδωσης και γένεση πλέγματος

Προετοιμασία του γεωμετρικού σχήματος

Το σχήμα της διακλάδωσης παράγεται από το πρόγραμμα 3D Slicer[®] με βάση δεδομένα ιατρικής απεικόνισης. Το παραγόμενο σχήμα είναι ένα κλειστό χωρίο, οπότε η επιφάνεια έπρεπε να χωριστεί σε ανοιχτά χωρία για να εφαρμοστεί η μέθοδος γένεσης πλέγματος που αναπτύξαμε. Αυτό έγινε με την χρήση ενός λογισμικού ανοιχτού κώδικα που απεικονίζει μεγάλα γεωμετρικά μοντέλα με την χρήση γραφικού περιβάλλοντος (Pyformex). Με τη χρήση του προαναφερόμενου προγράμματος χωρίσαμε τα χωρία όπως φαίνεται στο σχήμα 3.8b).



Σχήμα 3.8 : (a) Η οπτικοποίηση της τριγωνοποίησης της επιφανείας της διακλάδωσης κοιλιακής αορτής (b) Η γεωμετρία της διακλάδωσης κοιλιακής αορτής χωρισμένη σε ανοιχτά χωρία.

Ως συνέπεια του χωρισμού, η κύρια αριστερή διακλάδωση σχηματίζεται ως ένα ασυνεχές χωρίο με ένα άνοιγμα στη θέση όπου ο δεξιός κλάδος της διακλάδωσης ήταν παλαιότερα ενωμένος. Η μεθοδολογία γένεσης πλέγματος μπορεί να εφαρμοστεί μόνο σε συνεχή χωρία. Για να ξεπεράσουμε αυτή την δυσκολία αναπτύξαμε μια τεχνική που μετέτρεψε αυτό το μειονέκτημα σε χρηστικό πλεονέκτημα της μεθόδου.

Δημιουργία πλέγματος

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζεται η μέθοδος για την παραγωγή ενός δομημένου επιφανειακού πλέγματος με ταυτόχρονη προπαρασκευή του πλέγματος για μια ένα-προς-μία ένωση των δύο κλάδων της διακλάδωσης. Η μέθοδος γένεσης επιφανειακού πλέγματος είναι μια προέκταση της μεθοδολογίας που παρουσιάζεται σε προηγούμενο κεφάλαιο [Makris et al. 2012] και παράγει ένα πλέγμα πιστό στην αρχική γεωμετρία με πολύ απλή τοπολογία.

Ως μέρος της μεθόδου, έχει αναπτυχθεί μια νέα προσέγγιση για τον χειρισμό του ανοίγματος που σχηματίζεται στην κύρια διακλάδωση, που φαίνεται στο Σχήμα 3.9a), λόγω διαχωρισμού του αρχικού γεωμετρικού σχήματος.



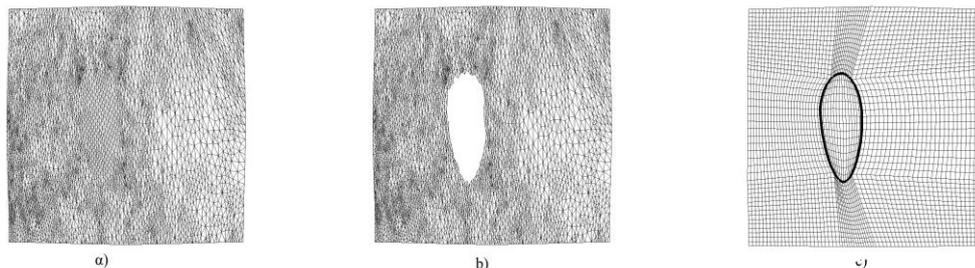
Σχήμα 3.9: (a) Το αριστερό σκέλος της διακλάδωσης με το άνοιγμα. (b) Το ίδιο σκέλος με το άνοιγμα συμπληρωμένο από τρίγωνα.

Η νέα προσέγγιση αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

- Δημιουργία ενός γεμίσματος από τρίγωνα στο άνοιγμα της 3D γεωμετρίας.
- Δημιουργία της επίπεδης ένα – προς- ένα τριγωνοποίησης.
- Εξαγωγή του συνόρου του ανοίγματος από την επίπεδη τριγωνοποίηση
- Δημιουργία επίπεδου δομημένου πλέγματος πολλαπλών χωρίων με την οριοθέτηση ενός χωρίου εντός της καμπύλης του ανοίγματος.

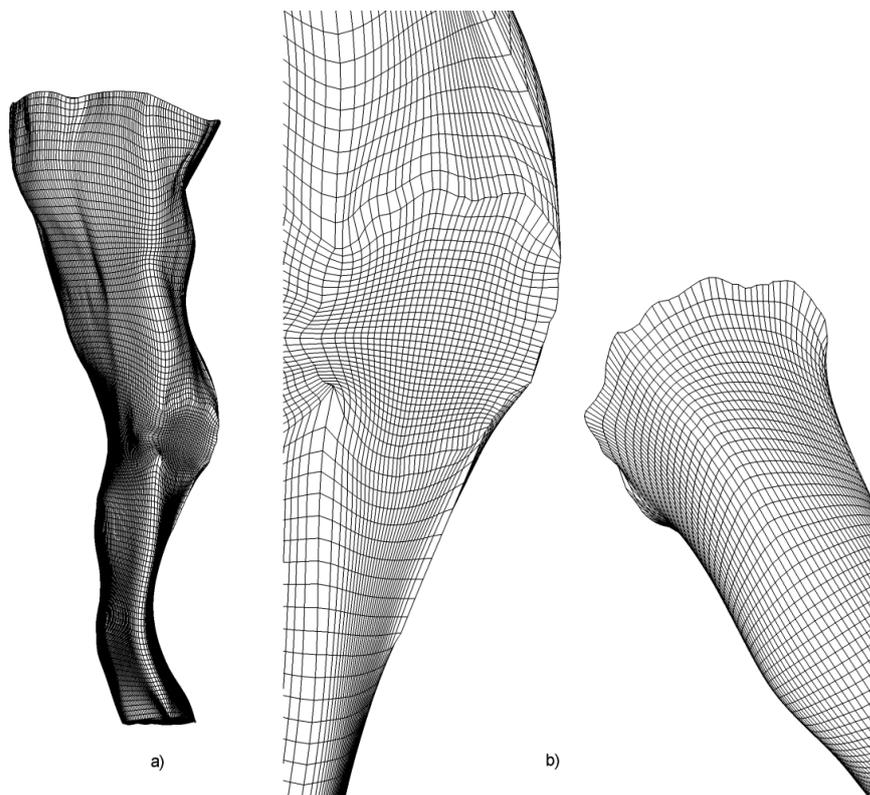
- Δημιουργία του 3D δομημένου πλέγματος με την ταυτόχρονη προετοιμασία για ένωση ένα-προς ένα με το δεύτερο σκέλος της διακλάδωσης.

Το άνοιγμα στο τρισδιάστατο χωρίο κλείνει με τρίγωνα με την εφαρμογή μιας τεχνικής δημιουργίας μη δομημένου πλέγματος π.χ. τη μέθοδο του προελαύνοντος μετώπου [Gordon W. N. and Hall C.A. 1973]. Το πλήρες επιφανειακό χωρίο φαίνεται στο σχήμα 3.9b). Εν συνεχεία η εφαρμογή της μεθόδου περιλαμβάνει την δημιουργία μιας επίπεδης ισόμορφης τριγωνοποίησης από την επιφανειακή τριγωνοποίηση. Η επίπεδη τριγωνοποίηση που φαίνεται στο σχήμα 3.10a) είναι το αποτέλεσμα της εφαρμογής της μεθόδου στην επιφάνεια που φαίνεται στο σχήμα 3.9b).



Σχήμα 3.10: (a) Η επίπεδη τριγωνοποίηση που αντιστοιχεί στο “πλήρες” χωρίο (b) Η επίπεδη τριγωνοποίηση μετά από αφαίρεση των τριγώνων που αντιστοιχούν στο άνοιγμα (c) Το επίπεδο δομημένο πλέγμα πολλαπλών χωρίων.

Οι δείκτες των τριγώνων που σχηματίζονται εντός του ανοίγματος είναι γνωστοί και έτσι είναι πολύ απλό να αφαιρέσουμε τα τρίγωνα από την επίπεδη τριγωνοποίηση. Το αποτέλεσμα αυτής της αφαίρεσης μας οδηγεί σε μια επίπεδη τριγωνοποίηση με άνοιγμα όπως αυτή φαίνεται στο σχήμα 3.10b). Στη συνέχεια εξάγουμε το περίγραμμα του ανοίγματος, όπως φαίνεται με έντονη γραμμή στο Σχήμα 3.10c) και το χρησιμοποιούμε σαν όριο στην Δημιουργία ενός επίπεδου δομημένου πλέγματος πολλαπλών χωρίων όπως αυτό φαίνεται στο σχήμα 3.10c). Με την προβολή του δομημένου πλέγματος πάνω στην επίπεδη τριγωνοποίηση και με εφαρμογή της μεθόδου που έχει αναπτυχθεί σε προηγούμενο κεφάλαιο προκύπτει ένα επιφανειακό δομημένο πλέγμα πολλαπλών χωρίων όπως φαίνεται στο σχήμα 3.11.



Σχήμα 3.11: (a) Το επιφανειακό δομημένο πλέγμα που δημιουργήθηκε (b) Το δεύτερο σκέλος της διακλάδωσης φτιαγμένο για ένωση ένα προς ένα.

Αξίζει να σημειωθεί ότι στο σημείο που υπήρχε προηγουμένως το άνοιγμα έχει σχηματιστεί επιφάνεια που αντιστοιχεί σε ένα χωρίο δομημένου πλέγματος και χρησιμοποιείται για την ένωση ένα - προς - ένα με το πλέγμα του δεύτερου σκέλους της διακλάδωσης.

Αφού δημιουργούνται τα επιφανειακά δομημένα πλέγματα, διεξάγεται η ενοποίηση και η δημιουργία ενός αρχικού 3D πλέγματος με την χρήση της μεθόδου TFI. Έτσι το τελικό σχήμα διακλάδωσης αποτελείται από 2 υπολογιστικά χωρία δομημένου πλέγματος, ένα για κάθε κλάδο..

3.2.3 Σύγκριση του πλέγματος με μη δομημένα πλέγματα.

Προκειμένου να αξιολογηθεί η ποιότητα της προτεινόμενης μεθοδολογίας τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων CFD μέσα στην διακλάδωση συγκρίνονται με εκείνα που λαμβάνονται από την χρήση μη δομημένων πλεγμάτων. Ειδικότερα, το δομημένο πλέγμα που δημιουργείται από την προτεινόμενη μεθοδολογία και τρία μη δομημένα πλέγματα που δημιουργήθηκαν από το εμπορικό λογισμικό ANSYS ICEM CFD® χρησιμοποιούνται. Τα τρία μη δομημένα πλέγματα δημιουργήθηκαν με τη μέθοδο του προελαύνοντος μετώπου και αποτελούνται από 335.986, 842.577 και 2.137.266 χιλιάδες τετραεδρικά στοιχεία και ονομάζονται U1, U2 και U3 αντίστοιχα. Υπενθυμίζεται ότι το δομημένο πλέγμα, αποτελείται από 334.986 εξαεδρικά στοιχεία και έχει επιλεγεί ως η βέλτιστη πλεγματική ανάλυση για τη περίπτωση μας. Τα λεπτομερή στοιχεία για τα υπολογιστικά πλέγματα που χρησιμοποιήθηκαν για τη σύγκριση, παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.3.

Προκειμένου να εκτιμηθεί η ποιότητα των συγκρινόμενων πλεγμάτων, υπολογίστηκε η μετρική στρέβλωσης (SKM) τόσο για το δομημένο όσο και για τα μη δομημένα πλέγματα. Τα αποτελέσματα της μετρικής πλέγματος

για τα υπολογιστικά πλέγματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.2. Τόσο η ομαδοποίηση και ταξινόμηση είναι κοινή και για τα δύο είδη πλεγμάτων.

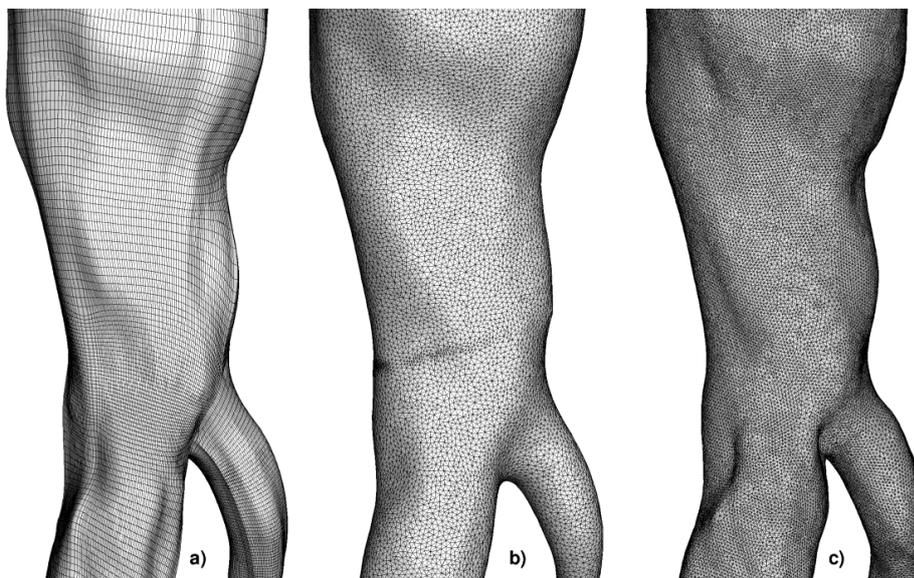
SKM	S	U1	U2	U3
	Αριθμός Στοιχείων - Ποσοστό (%)	Αριθμός Στοιχείων - Ποσοστό (%)	Αριθμός Στοιχείων - Ποσοστό (%)	Αριθμός Στοιχείων - Ποσοστό (%)
0.0 – 0.25 (Άριστο)	169104 – 50.48	42196 – 12.56	107682 – 12.78	321767 – 15.05
0.25 – 0.50 (Καλό)	148512 – 44.33	258376 – 76.92	649410 – 77.07	1622952 – 75.93
0.50 – 0.75 (Μέτριο)	16691 – 4.98	35306 – 10.51	85452 – 10.14	192463 – 9.00
0.75 – 1.00 (Κακό)	679 - 0.20 (max 0.91)	19 – 0.005 (max 0.87)	33 – 0.004 (max 0.86)	84 – 0.004 (max 0.89)
Σύνολο	334986 - 100	335897	842577	2137266

Πίνακας 3.2. Η μετρική “στρέβλωσης” (SKM) υπολογισμένη για τα συγκρινόμενα χωρία.

Όνομα	Πλήθος στοιχείων	Τύπος πλέγματος
U1	335897	Tetrahedral Unstructured
U2	842577	Tetrahedral Unstructured
U3	2137266	Tetrahedral Unstructured
S	334986	Hexahedral Structured

Πίνακας 3.3: Το πλήθος στοιχείων και ο πλεγματικός τύπος των συγκρινόμενων χωρίων.

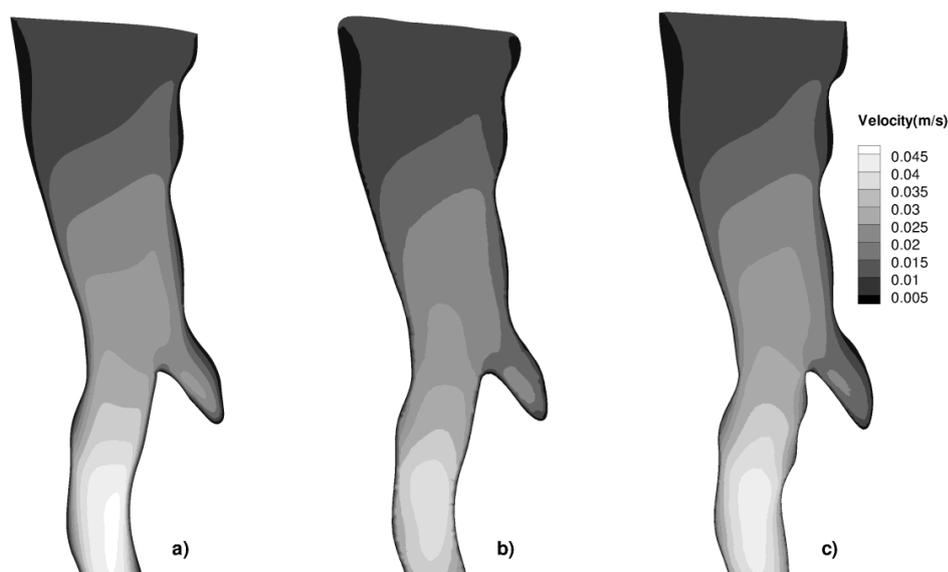
Τα υπολογιστικά χωρία που χρησιμοποιήθηκαν στην σύγκριση φαίνονται στο σχήμα 3.12.



Σχήμα 3.12: Τα υπολογιστικά χωρία που χρησιμοποιήθηκαν στην σύγκριση (a) Το δομημένο πλέγμα S (b) Το “αραιό” μη δομημένο πλέγμα U1. (c) Το “πυκνό” μη δομημένο πλέγμα U3.

Το πεδίο ροής υπολογίζεται χρησιμοποιώντας Ansys CFX ® σε όλες τις περιπτώσεις. Η προσομοίωση αντιπροσωπεύει μια χαρακτηριστική περίπτωση της ροής του αίματος στην ανθρώπινη κοιλιακή αορτή. Το αίμα θεωρείται ότι είναι ένα ασυμπιεστο, ομοιογενές, Νευτώνειο ρευστό, με πυκνότητα ίση με 1056 kg/m^3 και δυναμικό ιξώδες ίσο με $3,1 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$.

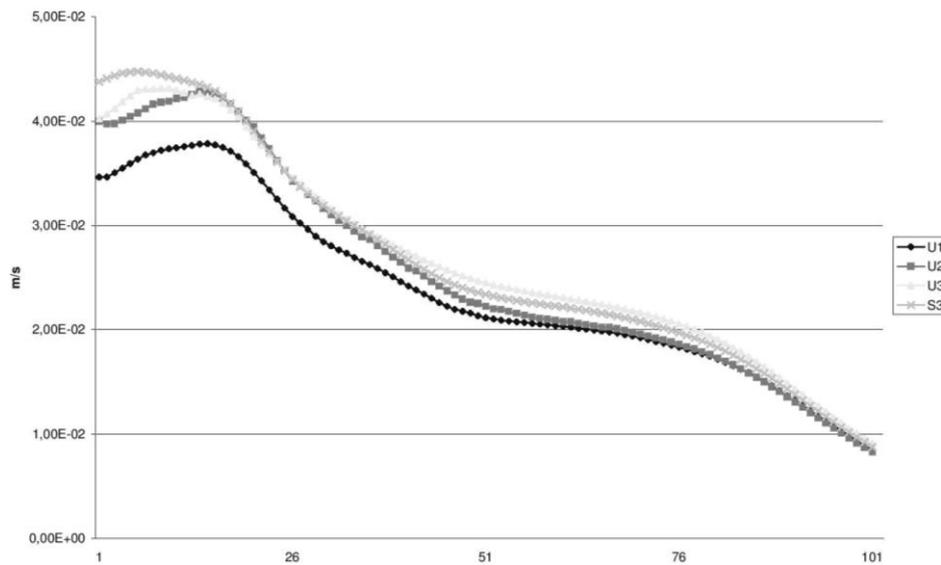
Για να γίνει μια συνολική αξιολόγηση έγιναν τόσο οπτικές όσο και ποσοτικές συγκρίσεις. Το σχήμα 3.13 α) έως γ) δίνει ένα επίπεδο με κατανομές ταχύτητας για τα τρία υπολογιστικά πλέγματα S, U1 και U3, αντίστοιχα. Μια οπτική σύγκριση των χρωμάτων αποκαλύπτει το γεγονός ότι τα μη δομημένα πλέγματα υποεκτιμούν τις ταχύτητες, με το γεγονός να είναι πιο έντονο στο “αραιό” μη δομημένο πλέγμα U1.



Σχήμα 3.13: Μια παρουσίαση επιπέδων με τις κατανομές του μέτρου της ταχύτητας για τρία υπολογιστικά χωρία. (a) Το δομημένο πλέγμα S (b) Το “αραιό” μη δομημένο πλέγμα U1. (c) Το “πυκνό” μη δομημένο πλέγμα U3.

Η σύγκριση δείχνει ότι το δομημένο πλέγμα υπολογίζει πιο ομαλά πεδία ροής. Η παρουσία των σγουρών ορίων στα περιγράμματα των κατανομών στο μη δομημένο "αραιό" πλέγμα U1 μας δείχνουν υψηλή αριθμητική στρέβλωση. Το φαινόμενο εξομαλύνεται και είναι σχεδόν αόρατο για το "πυκνό" μη δομημένο πλέγμα U3. Ωστόσο, το δομημένο πλέγμα S παρείχε ομαλές μεταβάσεις ταχύτητας με τη χρήση λιγότερων στοιχείων (περίπου τέσσερις φορές λιγότερα) από το "πυκνό" μη δομημένο πλέγμα U3.

Για να γίνει ποσοτική σύγκριση μεταξύ διαφορετικών πλεγμάτων, τα μέτρα των ταχυτήτων για 100 γεωμετρικά σημεία μέσα στο υπολογιστικό πεδίο απεικονίζονται στο σχήμα 3.14.



Σχήμα 3.14: Σύγκριση του μέτρου της ταχύτητας σε 100 σημεία για το δομημένο πλέγμα S και τα μη δομημένα πλέγματα U1,U2 και U3.

Το σχήμα 3.14 δίνει ποσοτικά δεδομένα των ταχυτήτων για τα μη δομημένα πλέγματα U1,U2 και U3. Έχει αποδειχθεί ότι τα μη δομημένα πλέγματα υπολογίζουν χαμηλότερα μεγέθη ταχύτητας, το οποία μπορεί να είναι συνέπεια της κακής ευθυγράμμισης μεταξύ του πρωτεύοντος διανύσματος ταχύτητας και των τετραεδρικών στοιχείων των πλεγμάτων.

Ειδικότερα, η χρήση του μη δομημένου πλέγματος U1 οδηγεί σε υποεκτίμηση της ταχύτητας σε ποσοστό 10.23% και υψηλή αριθμητική στρέβλωση. Μία βελτίωση του μη δομημένου πλέγματος κατά ένα συντελεστή 2,5 (U2, 842.577 στοιχεία) καταλήγει σε πλέγμα που δίνει λιγότερο εμφανή σημάδια της αριθμητικής στρέβλωσης και μια διαφορά στον υπολογισμό της ταχύτητας ίση με 5,03%. Επιπρόσθετη βελτίωση του μη δομημένου πλέγματος για την επίλυση του δικτύου U3 (2.137.266 στοιχεία) είχε ως αποτέλεσμα ένα σχετικό σφάλμα ίσο με 3,68% σε σχέση με S3.

Οι διαφορές που αναφέρονται εδώ και η παρουσίαση των πεδίων ροής που λαμβάνονται από τα διάφορα υπολογιστικά πλέγματα επιβεβαιώνουν τα συμπεράσματα στα οποία κατέληξαν προηγούμενες συγκριτικές μελέτες [Longest, P. W. and Vinchurkar S.2007; Vinchurkar S. and Longest P. W. 2008; De Santis G. et al. 2010], δηλαδή ότι το δομημένο πλέγμα είναι σε θέση να παρέχει πιο ακριβείς λύσεις πεδίου ροής από ένα μη δομημένο πλέγμα.

3.2.4. Συμπεράσματα

Η υπολογιστική μελέτη των βιολογικών γεωμετριών διακλάδωσης είναι ένα πεδίο το οποίο παρουσιάζει αυξανόμενο ενδιαφέρον τον τελευταίο καιρό λόγω της παρουσία παρόμοιων σχημάτων διακλάδωσης σε πολλά όργανα του ανθρώπινου σώματος. Οπότε, η μοντελοποίηση της γεωμετρίας διακλάδωση έχει γίνει ένα σημαντικό ζήτημα στις υπολογιστικές προσομοιώσεις.

Πολλές προηγούμενες μελέτες ανασκεύαζαν την γεωμετρία μίας διακλάδωσης με τη χρήση ενός μη δομημένου πλέγματος, με αποδοχή των μειονεκτημάτων του μη δομημένου πλέγματος. Μια σειρά από μελέτες έδειξαν ότι για γεωμετρία διακλάδωσης μοντελοποιημένη με τη χρήση ενός δομημένου πλέγματος είναι πολύ πιο αποτελεσματική και παράγει προσομοιώσεις ροής με χαμηλές αριθμητικές στρεβλώσεις και γρήγορη σύγκλιση. Στην παρούσα εφαρμογή εφαρμόσαμε την προτεινόμενη μέθοδο γένεσης πλέγματος σε μια γεωμετρία διακλάδωσης με πολύ καλά αποτελέσματα.

3.3 Μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων υπό πεδίο ροής υψίσυχνου ταλαντευτικού αερισμού και φυσιολογικής αναπνοής

Οι ρευστομηχανικές ιδιότητες της μεταφοράς αερίων με την μέθοδο του υψίσυχνου ταλαντευτικού αερισμού (High Frequency Oscillatory Ventilation - HFOV) στην περιοχή των ανθρώπινων πνευμόνων έχει μελετηθεί λεπτομερώς και με διαφορετικές μεθόδους. Η κύρια ιδέα του HFOV είναι ότι ωθεί τα αέρια σε κατώτερες γενιές του βρογχικού δένδρου, με επαρκή ανάμιξη και χαμηλούς αναπνεόμενους όγκους. Ωστόσο, η μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων υπό HFOV είναι μια περίπτωση κατά την οποία μπορούν να συμμετέχουν διαφορετικοί μηχανισμοί, σε σύγκριση με τους μηχανισμούς της μεταφοράς αερίων. Ο στόχος αυτής της εφαρμογής είναι να συγκρίνει αριθμητικά την αποτελεσματικότητα της εναπόθεσης φαρμακευτικών αερολυμάτων υπό HFOV και υπό πεδίο ροής κανονικής αναπνοής (NB) και να διευκρινίσει περαιτέρω τους μηχανισμούς της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων υπό ταλαντούμενες ροές.

Το πλήρως Eulerian μοντέλο που περιγράφεται σε προηγούμενο κεφάλαιο της διατριβής χρησιμοποιείται για τη μελέτη της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων διαφόρων μεγεθών, κάτω από διαφορετικές συνθήκες ταλαντωμένης ροής, μέσα σε μια φυσιολογικά ρεαλιστική διακλάδωση (physiologically realistic bifurcation - PRB) που δημιουργείται από τις γενεές G3 - G4 του ανθρώπινου πνεύμονα.

Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι το πεδίο (HFOV) εμφανίζει ισχυρότερες δευτερεύουσες ροές, λεπτότερα οριακά στρώματα και ισχυρές αντιστροφές ροής που προκαλούν μεγαλύτερη εναπόθεση σωματιδίων από μια ροή χαμηλότερης συχνότητας ταλάντωσης (NB).

3.3.1 Ροή αέρα υπό πεδίο ροής υψίσυχνου ταλαντευτικού αερισμού

Ο υψίσυχνος ταλαντευτικός αερισμός (High Frequency Oscillatory Ventilation - HFOV) είναι μια τεχνική μηχανικής υποστήριξης αναπνοής που βοηθά ή αντικαθιστά την φυσιολογική αναπνοή. Κύριο πεδίο εφαρμογής είναι ο επαρκής αερισμός των νεογνών. Το HFOV χαρακτηρίζεται από υψηλή συχνότητα ταλάντωσης (5 - 50 Hz), χαμηλούς αναπνεόμενους όγκους και σε αντίθεση με άλλες τεχνικές μηχανικού αερισμού χρησιμοποιεί παλινδρομικές αντλίες ή διαφράγματα με σκοπό την παραγωγή μηχανικώς ενεργής εισπνοής και εκπνοής.

Ο HFOV χρησιμοποιείται συνήθως για τη θεραπεία πνευμονικών νόσων, όπως η οξεία πνευμονική βλάβη (ALI) και το σύνδρομο οξείας αναπνευστικής δυσχέρειας (ARDS) σε ενήλικες και σε βλάβες όπως το διάμεσο πνευμονικό εμφύσημα (PIE) και λοιποί βρογχοκυψελιδικοί τραυματισμοί σε νεογνά [Clark et al. 1986; Derdak et al. 2002; The Acute Respiratory Distress Syndrome Network.2000].

Οι μηχανισμοί του HFOV για τη μεταφορά του αερίων στην περιοχή των ανθρώπινων πνευμόνων έχουν μελετηθεί πειραματικά, αριθμητικά και σε θεωρητική βάση, προκειμένου να αποσαφηνιστεί η φυσιολογία τους. Η κύρια ιδέα του HFOV είναι η αύξηση της διάχυσης και η βελτίωση της διαμήκου μεταφοράς αερίου με τελικό στόχο να προωθούνται τα αέρια σε κατώτερες διακλαδώσεις του βρογχικού δένδρου, με επαρκή ανάμιξη.

Οι Lunkenheimer et al. [1972] εισήγαγαν την μέθοδο του HFOV σαν μια βελτίωση στις μεθόδους υψίσυχνου μηχανικού αερισμού. Πλήθος θεωρητικών [Watson EJ 1983], πειραματικών [Joshi et al. 1983; Heraty et al. 2008] και υπολογιστικών μελετών [Zhang et al. 2002; Choi et al. 2010; Scholz A.W. et al. 2011; Hirahara et al.

2011] έχουν πραγματοποιηθεί από τότε και έχουν καταλήξει στο συμπέρασμα ότι η αύξηση της διάχυσης μέσω της υψίσυχνης ταλάντωσης του πεδίου ροής ενισχύει την κατά μήκος μεταφορά των αερίων.

Επιπρόσθετα οι Krishnan και Brower ανέπτυξαν μια εποπτική μελέτη [2010] και κατέληξαν ότι η θεραπεία με HFOV είναι ανώτερη από την παραδοσιακή μηχανική υποστήριξη αερισμού και μπορεί πειραματικά να χρησιμοποιηθεί για την θεραπεία ενός μεγάλου εύρους πνευμονικών ασθενειών.

3.3.2 Μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων υπό πεδίο ροής υψίσυχνου ταλαντευτικού αερισμού

Η πνευμονική εναπόθεση εισπνεόμενων φαρμακευτικών αερολυμάτων υπό πεδίο HFOV είναι ένα θέμα υψηλού ενδιαφέροντος. Όμως η μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων υπο πεδίο HFOV είναι μια σπανιώς μελετώμενη περίπτωση λόγω των δυσκολιών των in – vivo μετρήσεων και των ηθικών περιορισμών στην εκτέλεση μελετών σε νεογνά [Sood et al. 2010]. Εντούτοις ένα περιορισμένο πλήθος πειραματικών μελετών που αφορούν την εναπόθεση φαρμακευτικών αερολυμάτων υπό πεδίο ροής HFOV υπάρχουν στην βιβλιογραφία [Sood et al. 2010; Briant and Lippmann 1992 ; Garner et al. 2000 ;Alzahrani 2010] .

Το κίνητρο για την ανάπτυξη της συγκεκριμένης εφαρμογής είναι το γεγονός ότι κατά την μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων συμμετέχουν διαφορετικοί μηχανισμοί συγκρινόμενοι με την περίπτωση της μεταφοράς αερίων. Η ενίσχυση της μεταφοράς αερίων μέσω ενός μηχανισμού εξαναγκασμένης διάχυσης μπορεί να μεταφέρει τα αέρια βαθύτερα στον πνεύμονα αλλά πιθανώς να μην επιδρά με τον ίδιο τρόπο στα σωματίδια. Η σωματιδιακή αδράνεια και οι ενισχυμένες δευτερεύουσες και ανεστραμμένες ροές μπορεί να παίζουν σημαντικό ρόλο και να οδηγούν σε ένα διαφορετικό αποτέλεσμα.

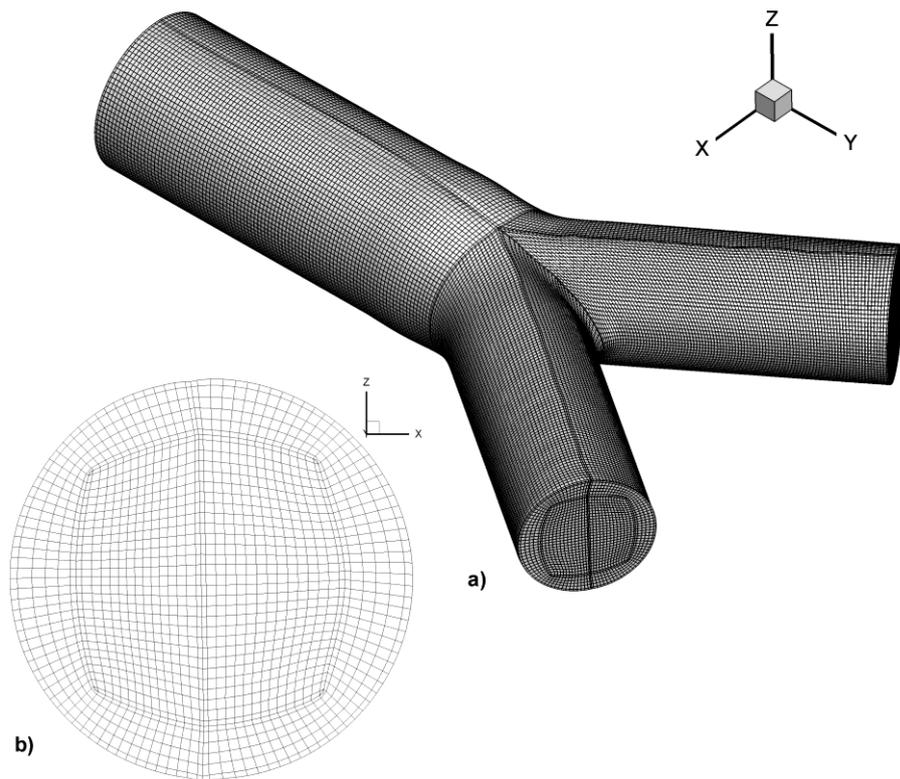
Η παρούσα εφαρμογή είναι μια υπολογιστική προσομοίωση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων υπό πεδίο HFOV και πεδίο φυσιολογικής αναπνοής (NB), εντός μιας φυσιολογικής ρεαλιστικής διακλάδωσης που αναπαριστά την τρίτη και τέταρτη (G3 – G4) γενιά των πνευμόνων. Η υπολογιστική μελέτη βασίζεται σε μια πλήρως Eulerian προσέγγιση για τον αέρα και τα σωματίδια και ο τελικός στόχος είναι η σύγκριση της εναπόθεσης φαρμακευτικών αερολυμάτων υπό διαφορετικές συνθήκες ροής και η περαιτέρω μελέτη των μηχανισμών μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων υπό ταλλαντούμενες ροές.

3.3.3 Γεωμετρία και Πλέγμα

Η γεωμετρία της μελέτης είναι μια φυσιολογικά ρεαλιστική διακλάδωση που αναπαριστά την τρίτη και τέταρτη γενιά των πνευμόνων και είναι βασισμένη σε γεωμετρικά χαρακτηριστικά που περιγράφονται από το μοντέλο του Weibel [Weibel 1963]. Αυτές οι γενιές επιλέχθηκαν επειδή προηγούμενες πειραματικές μελέτες κατέγραψαν ότι σε αυτές συναντούμε το μέγιστο της εναπόθεσης των σωματιδίων εντός των πνευμόνων [Schlesinger et al. 1977]. Επιπρόσθετα η προσομοίωση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων εντός διακλάδωσης είναι σημαντική επειδή η διακλάδωση είναι ο βασικός δομικός λίθος της γεωμετρίας των πνευμόνων και έχει χρησιμοποιηθεί κατά επανάληψη στο παρελθόν σε αντίστοιχες εφαρμογές [Asgharian B. and Anjilvel S. 1994; Kim et al. 1994; Comer et al. 2001a].

Το υπολογιστικό πλέγμα της εφαρμογής κατασκευάστηκε από τον κώδικα γένεσης πλέγματος που παρουσιάζεται σε άλλο κεφάλαιο της παρούσας διατριβής [Makris et al. 2012]. Στο σχήμα 3.15 φαίνεται το

υπολογιστικό χωρίο της μελέτης, το οποίο είναι ένα δομημένο πλέγμα πολλαπλών χωρίων που ακολουθεί την τοπολογία “πεταλούδας”.



Σχήμα 3.15 : Το υπολογιστικό χωρίο της μελέτης **a)** Το δομημένο πλέγμα πολλαπλών χωρίων που ακολουθεί την τοπολογία “πεταλούδας”, **b)** αναπαράσταση από το εσωτερικό του πλέγματος.

3.3.4 Προσομοίωση μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων.

Η αριθμητική προσομοίωση του πεδίου ροής του αέρα γίνεται από το εμπορικό λογισμικό ANSYS CFX®. Η προσομοίωση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων γίνεται από το μοντέλο που περιγράφεται εκτενώς σε προηγούμενο κεφάλαιο της παρούσας διατριβής.

Τα σωματίδια παρέχονται συνεχώς κατά τη διάρκεια του υπολογιστικού πειράματος και η εναπόθεση και συγκέντρωση των σωματιδίων, υπολογίζεται κατά τη διάρκεια πολλών χρονικών περιόδων και συνολικά. Η αριθμητική προσομοίωση πείραμα αντιστοιχεί σε 12 δευτερόλεπτα πραγματικού χρόνου. Παρ' όλα αυτά, λόγω της συμμετρίας που επιτεύχθηκε μετά τις πρώτες 4 περιόδους, τα αποτελέσματα μπορούν να επεκταθούν σε ένα μεγαλύτερο χρονικό διάστημα. Τα σωματίδια αερολύματος υποτίθεται ότι είναι σφαιρικά με διάμετρο που κυμαίνεται από 1nm έως 10μm.

NB - HFOV

Ως οριακή συνθήκη εισόδου χρησιμοποιήθηκε μια ημιτονοειδής κυματομορφή ταχύτητας και για τις δύο περιπτώσεις. Η συχνότητα θεωρήθηκε ίση με 0,25 Hz για την κανονική αναπνοή και ίση με 16 Hz για την

περίπτωση του HFOV. Οι δύο ροές παράγουν τον ίδιο μέγιστο αριθμό Reynolds που ορίζεται από τη μέγιστη ταχύτητα εισόδου στην φάση της εισπνοής. Ο αριθμός Reynolds υπολογίζεται από την εξίσωση (3.2),

$$\text{Re} = \frac{U_0 D}{\nu}, \quad (3.2)$$

όπου U_0 είναι η μέγιστη ταχύτητα κατά την εισπνοή, D η διάμετρος του σωλήνα και ν το κινηματικό ιξώδες του ρευστού. Τα δυο διαφορετικά πεδία ροής παράγαν διαφορετικούς αναπνεόμενους όγκους. Ο αναπνεόμενος όγκος V_T υπολογίζεται από την εξίσωση (3.3),

$$V_T = \int_0^{T/2} U_o \sin(2\pi f) A dt = \frac{U_o A}{\pi f}, \quad (3.3)$$

όπου A είναι το εμβαδό της εισόδου και f η συχνότητα του πεδίου ροής.

Για την περίπτωση NB υπολογίστηκε ένας αναπνεόμενος όγκος ίσος με 0.10075 l και για την περίπτωση HFOV ένας αναπνεόμενος όγκος ίσος με 0.00157422 l. Ο αριθμός Womersley είναι ένας ευρέως χρησιμοποιούμενος αδιάστατος αριθμός για την περιγραφή ταλαντωμένων ροών και υπολογίζεται από την εξίσωση (3.4),

$$a = R \cdot \sqrt{\frac{\omega}{\nu}} \quad (3.4)$$

όπου R είναι η ακτίνα του σωλήνα και ω η γωνιακή συχνότητα της ροής. Στον Πίνακα 3.4 δίνεται μια σύνοψη των χαρακτηριστικών της ροής των δυο περιπτώσεων.

Περίπτωση	Περίοδος T(s)	Συχνότητα f (Hz)	Μέγιστος αριθμός Reynolds	Αναπνεόμενος ός όγκος (l)	Αριθμός Womersley
NB	4	0.25	1250	0.10075	0.886227
HFOV	0.0625	16	1250	0.00157422	7.08982

Πίνακας 3.4: Σύνοψη των χαρακτηριστικών της ροής των δυο περιπτώσεων.

Σωματίδια

Στο ανεπτυγμένο μοντέλο μεταφοράς και εναπόθεσης των σωματιδίων, η σωματιδιακή φάση προσομοιώνεται σαν ένας μονοδιασπαρμένος πληθυσμός σωματιδίων με πυκνότητα σημαντικά μεγαλύτερη από το ρευστό. Για να έχουμε μια εικόνα των μηχανισμών εναπόθεσης σωματιδίων και να αξιολογήσουμε τη χρήση του HFOV για χορήγηση φαρμακευτικών αερολυμάτων, πραγματοποιήθηκε σύγκριση για 6 διαφορετικά μεγέθη σωματιδίων. Τα σωματίδια θεωρούνται σφαιρικά με διάμετρο ίση προς 1 nm, 50 nm, 100 nm, 900 nm, 5 μm και 10 μm, αντίστοιχα. Η μεταφορά και η εναπόθεση για όλες τις διαμέτρους των σωματιδίων έχει μελετηθεί τόσο για HFOV όσο και NB συνθήκες. Στον Πίνακα 3.5 παρουσιάζεται η διάμετρος των σωματιδίων και ο αντίστοιχος αριθμός Stokes.

Μέγεθος Σωματιδίων	Αριθμός Stokes
1nm	7.1533×10^{-7}
50nm	4.0785×10^{-5}
100nm	9.3226×10^{-5}
900nm	3.0116×10^{-3}
5 μ m	8.1702×10^{-2}
10 μ m	3.2188×10^{-1}

Πίνακας 3.5: Διάμετροι σφαιρικών σωματιδίων και αριθμοί Stokes

Στην είσοδο της διακλάδωσης εισάγεται ένα σταθερό ομοιόμορφο προφίλ συγκέντρωσης σωματιδίων, για όλη τη διάρκεια της αριθμητικής προσομοίωσης. Η οριακή συνθήκη για τη συγκέντρωση των σωματιδίων επί του τοιχώματος είναι η συνθήκη του πλήρως απορροφητικού τοιχώματος. Συνεπώς, όταν ένα σωματίδιο χτυπήσει τον τοίχο υποτίθεται ότι εναποτίθεται χωρίς να είναι σε θέση να εισέλθει εκ νέου το πεδίο ροής.

Αποτελέσματα ρευστού

Τα προφίλ ταχύτητα της περίπτωσης HFOV διαφέρουν σημαντικά από αυτά της περίπτωσης NB. Κατά τη διάρκεια του HFOV η ροή στο κέντρο του χωρίου επηρεάζεται λιγότερο από τα οριακά στρώματα και παρουσιάζει ισχυρή χρονική υστέρηση φάσης στην αναστροφή της ροής. Από την άλλη πλευρά, στην περίπτωση NB η ροή στο κέντρο του χωρίου ακολουθεί περίπου τις ταλαντώσεις της πίεσης.

Στην περίπτωση του HFOV εμφανίζεται ισχυρή αντιστροφή ροής (συνύπαρξη εισπνοής και εκπνοής) κοντά στα τοιχώματα ενώ στην περίπτωση NB δεν εμφανίζεται σχεδόν καμία αντίθετη ροή. Η παρατήρηση αυτή είναι σύμφωνη με τους Heraty et al. [2008] και Lunkenheimer et al. [1972] που κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι η αύξηση της συχνότητας ταλάντωσης θα αυξήσει το φαινόμενο αντιστροφής της ροής. Για την περίπτωση του HFOV παρατηρήθηκαν υψηλότερες ταχύτητες στο κέντρο του σωλήνα και λεπτότερα οριακά στρώματα κοντά στο τοίχωμα. Ο σχηματισμός των λεπτότερων οριακά στρωμάτων αναμένεται με βάση το γεγονός ότι η HFOV περίπτωση έχει μεγαλύτερο αριθμό Womersley από την περίπτωση NB.

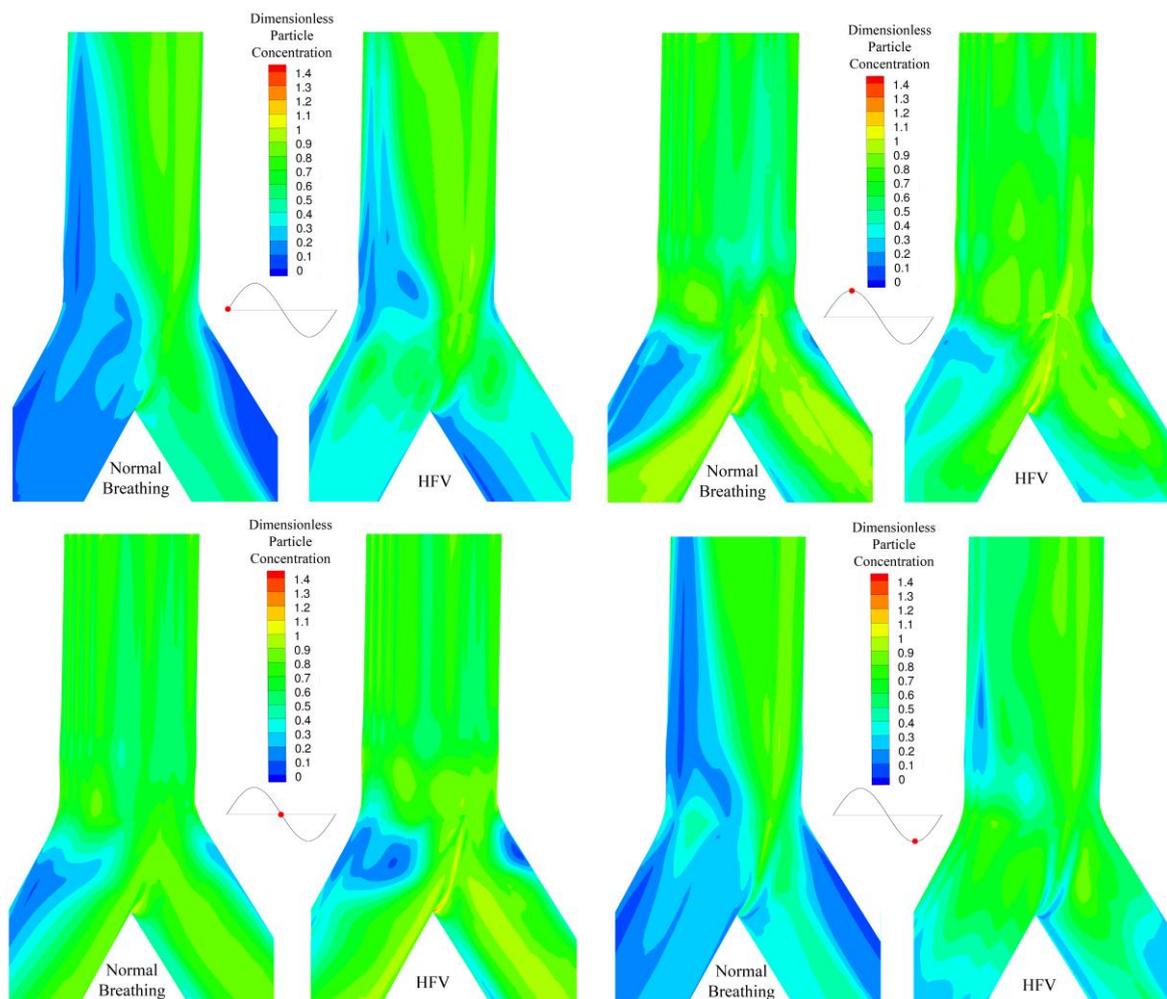
Επιπρόσθετα, οι δευτερεύουσες ροές για διατομές κοντά τις δύο εξόδους δείχνουν επιπλέον διαφορές για τα δυο πεδία ροής. Στην περίπτωση HFOV ένα ισχυρό ζεύγος δινών βρίσκεται στους αεραγωγούς κοντά στην έξοδο της διακλάδωσης. Στην περίπτωση NB αυτές οι δίνες δεν μπορούν να παρατηρηθούν. Επιπλέον, η περίπτωση του HFOV παρουσιάζει ισχυρότερες δευτερεύουσες ροές με μεγαλύτερη ταχύτητα από ό, τι η NB περίπτωση. Η παρατήρηση αυτή είναι κρίσιμη, διότι οι δευτερεύουσες ροές έχουν αναφερθεί να σχετίζονται έντονα με την εναπόθεση σωματιδίων [Hofmann et al. 2001].

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι μία μικρή ασυμμετρία παρατηρείται στις ταχύτητες μεταξύ των δυο σκελών της διακλάδωσης λόγω της ταχείας αλλαγής της κλίσης πίεσης. Η ασυμμετρία στις διακλαδωμένες ροές έχει προηγουμένως περιγραφεί στη βιβλιογραφία από πειραματικές [Lieber B. and Zhao Y. 1998] και υπολογιστικές μελέτες [Hofmann et al. 2001; Zhang Z. and Kleinstreuer C. 2002].

Αποτελέσματα σωματιδίων

Ένα από τα κύρια πλεονεκτήματα της Eulerian προσέγγισης είναι ότι επιτρέπει τον εύκολο υπολογισμό ενός προφίλ συγκέντρωσης σωματιδίων. Η χωρική κατανομή της συγκέντρωσης σωματιδίων, για σωματίδια με διάμετρο ίση προς 900nm, κάτω από συνθήκες HFOV και NB κοντά στο τοίχωμα παρουσιάζεται στο σχήμα 3.16. Η χρωματική κλίμακα επιλέχθηκε να μεταβάλλεται από 0.0 έως 1.4, ώστε να απεικονίσει τα αδιάστατα προφίλ συγκέντρωσης σωματιδίων.

Στην περίπτωση HFOV, λόγω των ενισχυμένων δευτερευουσών ροών, μία σημαντική ποσότητα σωματιδίων επικάθεται επί του εξωτερικού τοιχώματος των σκελών της διακλάδωσης. Επιπλέον, κατά την περίπτωση HFOV η μεγαλύτερη εναπόθεση σωματιδίων βρίσκεται κοντά στην περιοχή της καρίνας της διακλάδωσης.



Σχήμα 3.16: Αναπαράσταση της συγκέντρωσης σωματιδίων (για διάμετρο σωματιδίων ίση με 900nm) πάνω στο τοίχωμα για τις δυο περιπτώσεις σε διαφορετικές χρονικές στιγμές

Σύγκριση των κλασμάτων εναπόθεσης των δυο περιπτώσεων

Με σκοπό να παράγουμε μια ποσοτική σύγκριση της εναπόθεσης σωματιδίων στις δυο περιπτώσεις, το κλάσμα εναπόθεσης υπολογίστηκε για όλες τις διαμέτρους σωματιδίων. Το κλάσμα εναπόθεσης η υπολογίζεται από την εξίσωση (3.5),

$$\eta = 1 - \frac{\dot{c}|_{outlet}}{\dot{c}|_{inlet}}, \quad (3.5)$$

όπου $\dot{c} = \int_S c \vec{v}_p \cdot d\vec{S}$ είναι η αδιάστατη ροή συγκέντρωσης σωματιδίων μέσα από μια διατομή εμβαδού S . Οι

δείκτες “inlet” και “outlet” αναφέρονται στην είσοδο και τις εξόδους της διακλάδωσης αντίστοιχα

Η ποσότητα των σωματιδίων που εναποτέθηκε κατά τη διάρκεια του υπολογιστικού πειράματος υπολογίζεται για έξι διαφορετικά μεγέθη σωματιδίων. Στον Πίνακα 3.6 συνοψίζεται το κλάσμα εναπόθεσης για αμφότερες τις περιπτώσεις και για διαφορετικά μεγέθη σωματιδίων. Το προτεινόμενο μοντέλο προέβλεψε την χαρακτηριστικού σχήματος, U , εξάρτηση της εναπόθεσης σε συνάρτηση με τη διάμετρο των σωματιδίων που αναφέρεται από σειρά μελετών εναπόθεσης σωματιδίων [Hofmann 2011].

Μέγεθος σωματιδίων	HFOV	Normal Breathing
1 nm	68.74 %	61.71 %
50 nm	58.94 %	53.04 %
100 nm	58.92%	53.04 %
900 nm	58.96 %	53.07 %
5 μm	60.03 %	54.01 %
10 μm	65.66 %	57.21 %

Πίνακας 3.6: Κλάσμα εναπόθεσης σωματιδίων για όλα τα μεγέθη σωματιδίων για τις περιπτώσεις HFOV και NB.

Η περίπτωση HFOV δείχνει ισχυρότερη εναπόθεση για όλα τα μεγέθη σωματιδίων. Σε αντίθεση με το γεγονός ότι η εφαρμογή HFOV θα ενισχύσει την μεταφορά αερίων και θα τα ωθήσει σε χαμηλότερες γενιές του πνεύμονα, τα αδρανειακά σωματίδια παρουσιάζουν διαφορετική συμπεριφορά. Οι μηχανισμοί των ενισχυμένων δευτερευουσών ροών, της ισχυρής αντίστροφης ροής και τα λεπτότερα οριακά στρώματα που σχηματίζονται στο πεδίο ροής του HFOV, αυξάνουν την εναπόθεση σωματιδίων επί των τοιχωμάτων. Συμπερασματικά, οι μηχανισμοί μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων ενισχύουν την εναπόθεση υπό το πεδίο ροής HFOV σε σύγκριση με την περίπτωση NB.

Τα αποτελέσματα συμφωνούν με άλλες πειραματικές μελέτες που κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι η εναπόθεση σωματιδίων σε ένα μοντέλο των πνευμόνων θα είναι υψηλότερη υπό το πεδίο ροής HFOV [Alzahrani 2010].

3.3.5 Συμπεράσματα

Η παρούσα μελέτη είναι μια υπολογιστική προσομοίωση της μεταφοράς και εναπόθεσης αδρανειακών σωματιδίων, υπό πεδίο ροής HFOV και κανονικές συνθήκες αναπνοής, μέσα σε μια φυσιολογικώς ρεαλιστική διακλάδωση. Η υπολογιστική προσομοίωση βασίζεται σε μια πλήρως Eulerian (ρευστό και σωματίδια) προσέγγιση που προσομοιώνει την αδράνεια και τη διάχυση των σωματιδίων την ίδια στιγμή.

Το προτεινόμενο μοντέλο μας προσέφερε περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων σε πεδίο ροής με υψηλή συχνότητα ταλάντωσης. Η ανάλυση της μεταφοράς και εναπόθεσης για έξι διαφορετικά μεγέθη σωματιδίων σε δύο περιπτώσεις ταλάντωσης (HFOV και NB) έδειξε ότι διαφορετικοί μηχανισμοί λαμβάνουν μέρος σε σύγκριση με τους μηχανισμούς μεταφοράς αερίων. Αν και η ενίσχυση της διαμήκου μεταφοράς αερίου μέσω ενός μηχανισμού ενισχυμένης διάχυσης ωθεί τα αέρια σε χαμηλότερη γενιά του βρογχικού δέντρου, τα αντίστοιχα πεδία ροής λειτουργούν διαφορετικά όταν πρόκειται για την μεταφορά και εναπόθεση των σωματιδίων.

Το εξαιρετικά υψίσυχο πεδίο ροής (HFOV) έδειξε ισχυρότερες δευτερεύουσες ροές, λεπτότερα οριακά στρώματα και ισχυρές αντιστροφές ροής που συσώρευαν και εναπόθεσαν περισσότερα σωματίδια από την περίπτωση της ροής με χαμηλότερη συχνότητα ταλάντωσης (NB). Συμπερασματικά, η εναπόθεση φαρμακευτικού αερολύματος υπό HFOV θα οδηγήσει σε ισχυρότερη εναπόθεση επί των άνω γενεών του βρογχικού δέντρου σε σύγκριση με την κανονική αναπνοή.

Συμπεράσματα

4

Η αριθμητική προσομοίωση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων σε εσωτερικές ροές αερολύματος πολύπλοκης γεωμετρίας είναι ο κύριος στόχος της παρούσας διατριβής. Το κίνητρο αυτής της εργασίας προκύπτει από το υψηλό επιστημονικό και ιατρικό ενδιαφέρον για εξατομικευμένα μοντέλα που πετυχαίνουν ακριβή ανακατασκευή των γεωμετριών ανθρώπινων οργάνων και πρόβλεψη της συμπεριφοράς των μικρό-ή νάνο-σωματιδίων σε ροές εντός αυτών.

Στην παρούσα διατριβή προτείνεται μια νέα μέθοδος για την παραγωγή ενός υψηλής ποιότητας δομημένου πλέγματος, το οποίο αναπαράγει με πιστότητα την γεωμετρία των ανθρώπινων οργάνων, ξεκινώντας από δεδομένα ιατρικά απεικόνισης. Επιπλέον, διερευνώνται οι μηχανισμοί που διέπουν τις αλληλεπιδράσεις σωματιδίων - ρευστών χρησιμοποιώντας τεχνικές της μηχανικής των ρευστών και εισάγεται μια περαιτέρω βελτίωση σε ένα μοντέλο μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων.

Πρόσφατες πρόοδοι στις εξετάσεις ιατρικής απεικόνισης έχουν καταστήσει δυνατή μια εξατομικευμένη ανάλυση των βιολογικών ρευστών με την χρήση της υπολογιστικής μηχανικής. Μια σειρά από μελέτες χρησιμοποιούν εξατομικευμένες γεωμετρίες ασθενών για την προσομοίωση *in vivo* ροών μέσω της Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής (CFD). Αυτές οι μελέτες μπορούν να ταξινομηθούν ανάλογα με το είδος του χρησιμοποιούμενου υπολογιστικού πλέγματος και τη γεωμετρική πιστότητα μεταξύ του πλέγματος και της φυσικής γεωμετρίας. Η πλειοψηφία αυτών των μελετών ξεκινώντας από δεδομένα ιατρικής απεικόνισης παράγουν ένα μη δομημένο υπολογιστικό πλέγμα που συμμορφώνεται με τη γεωμετρία του ανθρώπινου οργάνου. Ωστόσο, μια σειρά από μελέτες, συμπεριλαμβανομένης της παρούσας διατριβής, έχουν δείξει ότι τα μη δομημένα πλέγματα παρέχουν λιγότερο ακριβείς λύσεις από ό, τι τα δομημένα. Μολονότι η ανωτερότητα του δομημένου πλέγματος είναι εμφανής, λίγες μόνο μελέτες χρησιμοποιούν δομημένα πλέγματα για τη μοντελοποίηση πραγματικών γεωμετριών από ασθενείς. Οι περισσότερες από τις μελέτες σε αυτή την κατηγορία περιγράφουν την γεωμετρία του ανθρώπινου οργάνου με βάση την παραμετροποίηση κάποιου προτύπου ή χρησιμοποιούν προσεγγιστικές περιγραφές της επιφάνειας του οργάνου και στην συνέχεια παραμορφώνουν κάποιο πρότυπο πλέγμα προκειμένου να συμμορφώνεται με τη γεωμετρική περιγραφή. Το κοινό χαρακτηριστικό σε αυτές τις μελέτες είναι η παραγωγή ενός δομημένου πλέγματος υψηλής ποιότητας με το μειονέκτημα της προσεγγιστικής αναπαράστασης της επιφάνειας.

Μια καινοτομία της διατριβής είναι η εισαγωγή μιας νέας μεθόδου που συνδυάζει την παραγωγή δομημένου πλέγματος με απόλυτη πιστότητα στην συγκεκριμένη γεωμετρία του ασθενούς. Ξεκινώντας από δεδομένα που λαμβάνονται από μια ιατρική εξέταση απεικόνισης, γίνεται η ανακατασκευή της γεωμετρίας του ανθρώπινου οργάνου καταλήγοντας σε μια τριγωνοποιημένη επιφάνεια (αναπαράσταση επιφάνειας τύπου STL). Από αυτή την επιφανειακή τριγωνοποίηση δημιουργείται ένα υψηλής ποιότητας δομημένο πλέγμα που συμπίπτει απόλυτα με την αρχική γεωμετρία. Για την αξιολόγηση της προτεινόμενης μεθόδου εκτελέστηκαν μία σειρά από συγκρίσεις μεταξύ διαφορετικών τύπων πλέγματος (μη δομημένα και υβριδικά πλέγματα). Οι συγκρίσεις επιβεβαίωσαν την υπεροχή του δομημένου πλέγματος σε πολλά επίπεδα. Επιπλέον, η προτεινόμενη μέθοδος εφαρμόστηκε σε γεωμετρίες διακλάδωσης μέσα στο ανθρώπινο σώμα και παρήγαγε υψηλής ποιότητας υπολογιστικά πλέγματα με απλή τοπολογία που μπορούν να συνδυαστούν με μοντέλα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD) και μοντέλα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και δυναμικής σωματιδίων (CFPD).

Το κίνητρο για την μοντελοποίηση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων προκύπτει από το επιστημονικό ενδιαφέρον που εκφράζεται για τη συμπεριφορά των μικρο-νάνο-σωματιδίων μέσα στο ανθρώπινο αναπνευστικό σύστημα.

Η μοντελοποίηση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων τείνει να είναι ζήτημα αναγκαιότητας, ειδικά σε περιπτώσεις όπου η άμεση πειραματική μελέτη περιορίζεται σε προσδιορισμό της συνολικής εναπόθεσης και σε περιπτώσεις όπου οι πειραματικές μελέτες είτε απαγορεύονται λόγω ηθικών λόγων ή είναι αδύνατες λόγω των εξαιρετικά πολύπλοκων πεδίων ροής. Σε αυτή τη διατριβή ένα μοντέλο υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και δυναμικής σωματιδίων που προτάθηκε παλαιότερα από τους Pilon et. al. [2011] αναπτύχθηκε περαιτέρω, προκειμένου να προσομοιώσει χρονικά μεταβαλλόμενες ροές σωματιδίων. Στο προτεινόμενο διφασικό (υγρό-σωματίδια) μοντέλο ο χειρισμός της εξίσωσης που διέπει τη μεταφορά των σωματιδίων (PTE) γίνεται με βάση μια πλήρως Eulerian προσέγγιση, τόσο για τον αέρα όσο και για την φάση των σωματιδίων.

Η αριθμητική προσέγγιση της μεταφοράς της σωματιδιακής φάσης βασίζεται σε τεχνικές υπολογιστικής ρευστομηχανικής. Ειδικότερα, η εξίσωση μεταφοράς σωματιδίων (PTE) επιλύεται σε τρεις διαστάσεις, χρησιμοποιώντας την μέθοδο των πεπερασμένων όγκων με μία ομόθετη διάταξη των μεταβλητών που λαμβάνει υπόψη την μη ορθογωνιότητα των πλεγμάτων. Ο όρος συναγωγής διακριτοποιείται χρησιμοποιώντας μια δεύτερης τάξης προσέγγιση αναβαλλόμενης διόρθωσης (deferred correction), ενώ ένα δεύτερης τάξης σχήμα κεντρικών διαφορών χρησιμοποιείται για την διακριτοποίηση του όρου της διάχυσης και ένα προς τα εμπρός Euler σχήμα χρησιμοποιείται για την διακριτοποίηση του όρου της χρονικής μεταβολής της συγκέντρωσης σωματιδίων. Η επικύρωση του νεοεισαγόμενου όρου της χρονικής μεταβολής επιτυγχάνεται μέσω συγκρίσεων με ένα πρόβλημα που έχει αναλυτική λύση, ενώ η ενσωμάτωση της αδράνειας των σωματιδίων στην εξίσωση μεταφοράς (PTE) γίνεται σύμφωνα με το προηγούμενος αναπτυχθέν και επικυρωθέν μοντέλο.

Συνολικά, τα πλεονεκτήματα της θεώρησης Euler, σε συνδυασμό με τον νέο εισαγόμενο όρο της χρονικής μεταβολής μας έδωσε ένα ισχυρό υπολογιστικό μοντέλο που μπορεί να παρέχει πληροφορία για τη μεταφορά και εναπόθεση των σωματιδίων υπό ασταθείς ροές.

Οι μέθοδοι που έχουν αναπτυχθεί σε αυτή τη διατριβή έχουν εφαρμοστεί στη μελέτη τριών περιπτώσεων. Στην εκτίμηση της ροής εντός ανευρύσματος κοιλιακής αορτής, στην παραγωγή ενός αποτελεσματικού υπολογιστικού μοντέλου για τη μελέτη μιας διακλάδωσης της κοιλιακής αορτής και στην αξιολόγηση της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων υπό πεδίο ροής υψίσυχνου ταλαντευτικού αερισμού και κανονικής αναπνοής.

Τα ακόλουθα αποτελέσματα προέκυψαν από την ανάπτυξη ενός μοντέλου εξατομικευμένης γεωμετρίας πραγματικού ασθενούς για τη γεωμετρία ανευρύσματος κοιλιακής αορτής και διακλάδωσης της κοιλιακής αορτής.

- Η χρήση δομημένου πλέγματος παρέχει πιο ομαλά πεδία ροής. Το μη δομημένο πλέγμα παρουσιάζει ενδείξεις υψηλής αριθμητικής στρέβλωσης με την εμφάνιση τραχών μεταβάσεων ταχύτητας σε γειτονικά γεωμετρικά σημεία

- Το δομημένο πλέγμα τείνει να είναι πιο ακριβές στην προσομοίωση των δευτερευουσών ροών και παρουσιάζει περισσότερες δευτερεύουσες δίνες στο πεδίο ροής σε σχέση με το μη δομημένο.
- Η χρήση των μη δομημένων πλεγμάτων οδηγεί στην υποεκτίμηση των δευτερευουσών ταχυτήτων και μπορεί να οδηγήσει σε υπολογισμό χαμηλότερης κατακόρυφης πίεσης στο τοίχωμα και σε μια υποεκτίμηση των διατημητικών τάσεων.
- Τα δομημένα πλέγματα επιτυγχάνουν ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα με την χρήση λιγότερων στοιχείων. Παρατηρήθηκε ότι τα δομημένα πλέγματα πετυχαίνουν λύσεις ίδιας ακρίβειας με την χρήση από 4 έως και 10 φορές μικρότερου πλήθους στοιχείων από τα αντίστοιχα μη δομημένα
- Η χρήση δομημένου πλέγματος μείωσε τον χρόνο επίλυσης σε σχέση με το μη δομημένο πλέγμα.
- Για γεωμετρίες διακλάδωσης η χρήση ενός δομημένου πλέγματος είναι πολύ πιο αποτελεσματική και παράγει προσομοιώσεις ροής με χαμηλή αριθμητική στρέβλωση και γρήγορη σύγκλιση σε σχέση με το μη δομημένο.
- Η χρήση δομημένου πλέγματος με την τοπολογία “ένα χωρίο ανά κλάδο” έχει το πλεονέκτημα της τοπολογικής απλότητας και παρέχει τη δυνατότητα να δημιουργήσουμε γεωμετρίες πολλαπλών διακλαδώσεων χωρίς περιορισμούς στο πλήθος των στοιχείων που έχουν άλλες τοπολογίες (τοπολογία πεταλούδα). Το κόστος της τυπολογικής απλότητας είναι η παραγωγή υπολογιστικών χωρίων που περιέχουν μερικά στρεβλωμένα στοιχεία στις γωνίες των χωρίων.

Τα ακόλουθα αποτελέσματα που αφορούν τη μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων έχουν εξαχθεί από την αριθμητική μελέτη της μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων υπό υψίσυχο ταλαντευτικό αερισμό και κανονική αναπνοή.

- Σε όλες τις χρονικές φάσεις υπάρχει μια περιοχή στο εξωτερικό τοίχωμα στην έναρξη των θυγατρικών αγωγών, απέναντι από τη διακλάδωση σχεδόν χωρίς καθόλου συγκέντρωση σωματιδίων.
- Διαφορετικοί μηχανισμοί μεταφοράς σωματιδίων λαμβάνουν μέρος σε σύγκριση με τους μηχανισμούς μεταφοράς αερίου.

- Η ενίσχυση της μεταφοράς αερίου μέσω ενός μηχανισμού εξαναγκασμένης διάχυσης ωθεί το αέριο σε χαμηλότερη γενιά του βρογχικού δέντρου. Όμως το αντίστοιχο πεδίο ροής επιδρά διαφορετικά όταν πρόκειται για την μεταφορά και εναπόθεση σωματιδίων
- Η παροχή φαρμακευτικού αερολύματος υπό πεδίο ροής υψίσυχνου ταλαντευτικού αερισμού θα οδηγήσει σε μεγαλύτερη εναπόθεση σωματιδίων επί των ανώτερων γενεών του βρογχικού δέντρου σε σύγκριση με την κανονική αναπνοή.

Τα παραπάνω συμπεράσματα δείχνουν με την προτεινόμενη μεθοδολογία μπορούν να ληφθούν οι ακριβείς προβλέψεις της μεταφοράς και εναπόθεσης βαρέων, αδρανών σωματιδίων αερολυμάτων σε μη μόνιμες ροές εντός πολύπλοκων γεωμετριών. Επιπλέον, η χρήση του μοντέλου επιτρέπει τον υπολογισμό όχι μόνο των κλασμάτων εναπόθεσης σωματιδίων, αλλά και την μελέτη των μηχανισμών εναπόθεσης σωματιδίων προσφέροντας χρήσιμες πληροφορίες με άμεσο τρόπο, κάτω από συνθήκες όπου οι άμεσες πειραματικές μέθοδοι είναι ανεφάρμοστες.

Επιπρόσθετα στις εσωτερικές ροές βιορευστών, μικρές διαφοροποιήσεις στη γεωμετρία του ανθρώπινου οργάνου μπορεί να είναι σημαντικές και υπεύθυνες για διάφορα φυσικά φαινόμενα. Σε αυτή την εργασία προτείνεται μια αποτελεσματική τεχνική για την γένεση δομημένων πλεγμάτων σε πραγματικές γεωμετρίες ασθενών. Συνολικά, η προτεινόμενη μεθοδολογία είναι ένα σημαντικό βήμα προς την κατεύθυνση CFPD μοντελοποίησης εξατομικευμένων περιπτώσεων ασθενών.

Ωστόσο, μπορεί να βελτιωθεί περαιτέρω στο τμήμα της γένεσης πλέγματος με την προσθήκη περισσότερων αυτοματισμών που θα μειώσουν την παρέμβαση του χρήστη και τον χρόνο δημιουργίας του πλέγματος. Επιπροσθέτως διαφορετικές τοπολογίες πλέγματος μπορεί να ενσωματωθούν και η μεθοδολογία μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε προσομοιώσεις εντός γεωμετριών με περισσότερες από δύο εξόδους, όπως το αορτικό τόξο ή ένα μοντέλο πνεύμονα πολλαπλών διακλαδώσεων. Μια περαιτέρω βελτίωση στο μοντέλο μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων μπορεί να είναι η ενσωμάτωση περισσότερων φυσικών φαινομένων που εμπλέκονται σε τέτοια συστήματα πολυφασικών ροών. Για παράδειγμα, το μοντέλο μπορεί να βελτιωθεί ουσιαστικά, εάν ενσωματωθούν σε αυτό οι εσωτερικές διαδικασίες αερολύματος, και επιλύεται η πλήρης Γενική Δυναμική Εξίσωση (GDE) σωματιδίων. Τέλος, η διασύνδεση όλων των στοιχείων λογισμικού που παρουσιάζονται σε αυτή τη διατριβή σε ένα γραφικό διαδραστικό περιβάλλον (GUI), θα παράγει ένα ισχυρό και ευέλικτο εργαλείο υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και δυναμικής σωματιδίων (CFPD).

References

Alzahrani Walled A. *Comparison of Albuterol Delivery between High Frequency Oscillatory Ventilation and Conventional Mechanical Ventilation in a Simulated Adult Lung Model using Different Compliance Levels*. Respiratory Therapy Theses. Georgia State University, Division of Respiratory Therapy Paper 10, 2010.

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.

Amestoy P.R., Duff I.S., Koster J. and L'Excellent J.E. A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling, *SIAM Journal of Matrix Analysis and Applications*, 23(1): 15-41,2001.

Amestoy P.R., Guermouche A. ,L'Excellent J.Y. and Pralet S. Hybrid scheduling for the parallel solution of linear systems. *Parallel Computing*, 32 (2):136-156,2006.

Antiga, L., Ene-Iordache B., Caverni L., Cornalba G.P. and Remuzzi A. Geometric reconstruction for computational mesh generation of arterial bifurcations from CT angiography. *Computerized Medical Imaging and Graphics*, 26:227-235, 2002.

Antiga, L., Piccinelli M., Botti L., Ene-Iordache B., Remuzzi A. and Steinman D.A. An image-based modeling framework for patient-specific computational hemodynamics. *Medical and Biological Engineering and Computing* , 46:1097-1112,2008.

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.

Baerentzen J.A., Aanaes H. Generating Signed Distance Fields from Triangle Meshes. *Informatics and Mathematical Modeling (IMM) Technical Report 21*, 2002.

Baker T.J. Automatic mesh generation for complex three-dimensional regions using a constrained Delaunay triangulation. *Engineering with Computers*, 5(3-4):161-175,1989.

Bazilevs Y., Calo V. M., Zhang Y., Hughes T. J. R. Isogeometric fluid-structure interaction analysis with applications to arterial blood flow. *Computational Mechanics*, 38:310-322,2006.

Bazilevs Y., and Hughes T. J. R. NURBS-based isogeometric analysis for the computation of flows about rotating components. *Computational Mechanics*, 43:143-150, 2008.

Bazilevs Y., Goheanb J.R., Hughes T.J.R., Moser R.D., Zhang Y. Patient-specific isogeometric fluid-structure interaction analysis of thoracic aortic blood flow due to implantation of the Jarvik 2000 left

ventricular assist device. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198:3534-3550,2009.

Briant J.K. and Lippmann M. Particle transport through a hollow canine airway cast by high-frequency oscillatory ventilation. *Experimental Lung Research*, 18:385-407,1992.

Brewer M., Freitag-Diachin L., Knupp P., Leurent T. and Melander D.J. The MESQUITE mesh quality improvement toolkit. In *Proceedings, 12th International Meshing Roundtable, pages 239–250. Sandia National Laboratories*, September 2003.

Breuer M., Baytekin H. and Matida E. Prediction of aerosol deposition in 90o bends using LES and an efficient lagrangian tracking method. *Journal of Aerosol Science*, 37: 1407–1428, 2006.

Choi J., Xia G., Tawhai M.H., Hoffman E.A., Lin C.L. Numerical study of high-frequency oscillatory air flow and convective mixing in a CT-based human airway model. *Annals of Biomedical Engineering*, 38(12):3550-3571,2010.

Cheng Y. and Wang C. Inertial deposition of particles in a bend. *Journal of Aerosol Science*, 6(10):139–145, 1975.

Cifuentes A.O. and Kalbag. A. A performance study of tetrahedral and hexahedral elements in 3-D finite element structural analysis. *Finite Elements in Analysis and Design*, 12(3-4):313–318, 1992.

Clark R.H., Gerstmann D.R., Null D.M., Yoder B.A., Cornish J.D., Glasier C.M., Ackerman N.B., Bell R.E., Delemos R.A. Pulmonary interstitial emphysema treated by high-frequency oscillatory ventilation. *Critical Care Medicine* 14(11):926-930, 1986.

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.

Crane R. and Evans R. Inertial deposition of particles in a bent pipe. *Journal of Aerosol Science*, 8:161–170, 1977.

De Santis, G., Mortier P., De Beule M., Segers P., Verdonck P., Verheghe B. Patient-specific Computational Fluid Dynamics: Structured mesh generation from coronary angiography. *Medical & Biological Engineering & Computing*, 48:371-380,2010.

De Santis G., De Beule M., Segers P, Verdonck P., Verheghe B. Patient – specific computational haemodynamics: generation of structured and conformal hexahedral meshes from triangulated surfaces

- of vascular bifurcations. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering* 14(9):797-802,2011.
- De Santis G., De Beule M., Van Canneyt K., Segers P., Verdonck P., Verhegghe B. Full-hexahedral structured meshing for image-based computational vascular modeling. *Medical Engineering & Physics*, 33(10):1318-25, 2011.
- Derdak S., Mehta S., Stewart T.E., Smith T., Rogers M., Buchman T.G., Carlin B., Lowson S., Granton J. High-frequency oscillatory ventilation for acute respiratory distress syndrome in adults: a randomized, controlled trial. *American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine* 166(6):801-808,2002.
- Deshpande M.D. Vinay B., Shankapal S. R., Prabhu Vinay M. D., Srinath M. G. Subject-specific blood flow simulation in the human carotid artery bifurcation. *Current Science*, 97:1303-1312, 2009.
- Desjardins O., Fox R. and Villedieu P. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. *Journal of Computational Physics*, 227:2514, 2008.
- Di Martino E.S., Guadagni G., Fumero A., Ballerini G., Spirito R., Biglioli P., Redaelli A. Fluid-structure interaction within realistic three-dimensional models of the aneurysmatic aorta as a guidance to assess the risk of rupture of the aneurysm. *Medical Engineering and Physics* 23:647-655,2001.
- Doyle B.J., Morris L.G., Callanan A., Kelly P., Vorp D.A., McGloughlin T.M. 3D reconstruction and manufacture of real abdominal aortic aneurysms: From CT scan to silicone model. *Journal of Biomechanical Engineering* 130(3):034501,2008.
- Doyle B.J., Cloonan A.J., Walsh M.T., Vorp D.A., McGloughlin T.M. Identification of rupture locations in patient-specific abdominal aortic aneurysms using experimental and computational techniques. *Journal of Biomechanics* 43(7):1408 – 1416, 2010.
- Drossinos Y. and Reeks M. Brownian motion of finite-inertia particles in a simple shear flow. *Physical Review E*, 71:031113, 2005.
- Drossinos Y. and Housiadas C. Aerosol Flows. In Crowe C., editor, *Multiphase Flow Handbook*. CRC Press, Boca Raton, 2006.
- 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.

Ferziger J. and Perić M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Germany, 3rd edition, 2002.

Finlay W. *The Mechanics of Inhaled Pharmaceutical Aerosols. An Introduction*. Academic Press, Bath, 2001.

Floater M.S. Parametrization and smooth approximation of surface triangulations. *Computer Aided Geometric Design*, 14:231-250, 1997.

Floater M.S., Kos G., Reimers M. Mean value coordinates in 3D. *Computer Aided Geometric Design*, 22:623-631, 2005.

Fredberg J.J., Glass G.M., Boynton B.R., Frantz I.D. 3rd. Factors influencing mechanical performance of neonatal high-frequency ventilators. *Journal of Applied Physiology*, 62(6):2485-2490, 1987.

Garner S.S., Wiest D.B, Bradley W. Albuterol delivery by metered-dose inhaler in a pediatric high-frequency oscillatory ventilation model, *Critical Care Medicine*, 28(6):2086-2089, 2000.

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.

Gallo D., De Santis G., Negri F., Tresoldi D., Ponzini R., Massai D., Deriu M.A., Segers P., Verheghe B., Rizzo G., Morbiducci U. On the Use of In Vivo Measured Flow Rates as Boundary Conditions for Image-Based Hemodynamic Models of the Human Aorta: Implications for Indicators of Abnormal Flow. *Annals of Biomedical Engineering*, 40(3):729-741, 2012.

Giannakoglou K.C., Chaviaropoulos P. and Papailiou K.D. Boundary-fitted parametrization of unstructured grids on arbitrary surfaces. *Advances in Engineering Software*, 27(1-2):41-49, 1996.

Gopalsamy S., Ross D., Ito Y., Shih A. Structured Grid Generation over NURBS and Faceted Surface Patches by Reparametrization. *Proceedings of the 14th International Meshing Roundtable*, 287-299, 2005.

Gordon W. N. and Hall C.A. Construction of curvilinear coordinate system and application to mesh generation. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* 7: 461-477, 1973.

Hammer S., Jeays A., Allan P.L., Hose R., Barber D., Easson W.J., Hoskins P.R. Acquisition of 3-D Arterial Geometries and Integration with Computational Fluid Dynamics. *Ultrasound in Medicine and Biology*, 35:2069-2083, 2009.

- Hansen G.A., Douglass R.W. and Zardecki A. *Mesh Enhancement: Selected Elliptic Methods, Foundations and Applications*. Imperial College Press, London, 2005.
- Heraty K.B., Laffey J.G., Quinlan N.J. Fluid dynamics of gas exchange in high-frequency oscillatory ventilation: in vitro investigations in idealized and anatomically realistic airway bifurcation models. *Annals of Biomedical Engineering*, 36(11):1856-1869, 2008.
- Hirahara H., Iwazaki K., Ahmmed M.U., Nakamura M. Numerical Analysis of Air Flow in Dichotomous Respiratory Channel with Asymmetric Compliance under HFOV Condition. *Journal of Fluid Science and Technology* 6(6):932-948, 2011.
- Hofmann W., Balashazy I. and Heistracher T. The Relationship between Secondary Flows and Particle Deposition Patterns in Airway Bifurcations. *Aerosol Science and Technology*, 35:958-968,2001.
- Hofmann W. Modelling inhaled particle deposition in the human lung – A review. *Journal of Aerosol Science*, 42:693-724, 2011.
- Joshi C.H., Kamm R.D., Drazen J.M., Slutsky A.S. An experimental study of gas exchange in laminar oscillatory flow. *Journal of Fluid Mechanics* 133:245-254, 1983.
- Jones W.M. *3D Distance from a Point to a Triangle*. Department of Computer Science, University of Wales Swansea Technical Report CSR-5, 1995.
- Kaul U.K. Three-dimensional elliptic grid generation with fully automatic boundary constrains. *Journal of Computational Physics*, 229(17):5966–5979, 2010.
- 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. *Biofluid Dynamics, Principles and Selected Applications*. Boca Ration,CRC press, 2006.
- Krishnan J. R. and Brower G. High frequency oscillation in acute lung injury and ARDS. *CHEST Journal*, 118(3):795-807,2010.
- Knupp P.M. Remarks on Mesh Quality. *In proceedings of the 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, NV, 2007.

Lee K., Johnson R.K., Yin Y., Wahle A., Olszewski M.E., Scholz T.D., Sonka M. Three-dimensional thrombus segmentation in abdominal aortic aneurysms using graph search based on a triangular mesh. *Computers in Biology and Medicine*, 40:271-278, 2010.

Li Z. and Kleinstreuer C. A comparison between different asymmetric abdominal aortic aneurysm morphologies employing computational fluid-structure interaction analysis. *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, 26:615-631, 2007.

Lieber B. and Zhao Y. Oscillatory Flow in a Symmetric Bifurcation Airway Model. *Annals of Biomedical Engineering*, 26:821-830, 1998.

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

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.

Long Q., Xu X.Y., Collins M.W., Bourne M. and Griffith T.M. Magnetic resonance image processing and structured grid generation of a human abdominal bifurcation. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 56:249-259, 1998.

Lunkenheimer P.P., Rafflenbeul W., Keller H., Frank I., Dickhut H.H., Fuhrmann C. Application of transtracheal pressure oscillations as a modification of "diffusing respiration". *British Journal of Anaesthesia*, 44(6):627, 1972.

Makris E., Gkanis V., Housiadas C. "A methodology to use the flow field from Ansys CFX® software in an in-house sectional aerosol dynamics code" *In proceeding of the European Aerosol Conference*, Karlsruhe, Germany, 2009.

Makris E., Gkanis V., Tsangaris S., 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(2):173-183, 2012a.

Makris E., Neofytou P., Tsangaris S., Housiadas C. A novel method for the generation of multi-block computational structured grids from medical imaging of arterial bifurcations. *Medical Engineering & Physics*, 34(8):1157-66, 2012b.

- Moller T. Fast triangle–triangle intersection test. *Doktorsavhandlingar vid Chalmers Tekniska Hogskola*. 123–129,1998.
- Neofytou P., Tsangaris S. Flow effects of blood constitutive equations on 3D models of vascular anomalies. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 51:489-510, 2006.
- Neofytou P., Tsangaris S., Kyriakidis M. Vascular wall flow-induced forces in a progressively enlarged aneurysm model. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 11:615-626, 2008.
- Patankar S. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor & Francis, 1980.
- Peraire J., Vahdati M., Morgan K., Zienkiewicz O.C. Adaptive remeshing for compressible flow computations. *Journal of Computational Physics*, 72(2): 449–466, 1987.
- Pieper S., Lorenzen B., Schroeder W., Kikinis R. The NA-MIC Kit: ITK, VTK, Pipelines, Grids and 3D Slicer as an Open Platform for the Medical Image Computing Community. *In the proceedings of the 3rd IEEE International Symposium on Biomedical Imaging: From Nano to Macro*. 1:698-701, 2006.
- 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.
- Pilou M., Tsangaris S., Neofytou P., Housiadas C., Drossinos Y. Inertial Particle Deposition in a 90B° Laminar Flow Bend: An Eulerian Fluid Particle Approach. *Aerosol Science and Technology*, 45:1376-1387, 2011.
- Pilou M., Antonopoulos V., Makris E., Neofytou P., Tsangaris S., Housiadas C. A Fully Eulerian Approach to Particle Inertial Deposition in a Physiologically Realistic Bifurcation. *Applied Mathematical Modelling*, 37(8):5591–5605, 2013
- Poirier D., Bush R., Cosner R., Rumshey C., McCarthy D.R. *Advances in the CGNS Database Standard for Aerodynamics and CFD*, American Institute of Aeronautics and Astronautics Paper. 0681, 2000.
- Ramshaw J. Brownian motion in a flowing fluid. *Physics of Fluids*, 22:1595–1601, 1979.
- Shepherd J.F. *Topologic and geometric constraint based Hexahedral mesh generation*. School of computing, University of Utah, 2007.
- Schlesinger R.B., Bohning D.E., Chan T.L., Lippmann M. Particle deposition in a hollow cast of the human tracheobronchial tree. *Journal of Aerosol Science*, 8:429-445, 1977.

Scholz A.W., Krenkel L., Terekhov M., Friedrich J., Rivoire J., Kobrich R., Wolf U., et al. Magnetic Resonance Imaging and Computational Fluid Dynamics of High Frequency Oscillatory Ventilation (HFOV). In *Fundamental Medical and Engineering Investigations on Protective Artificial Respiration. Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design* 116:107-128, 2011.

Shih A.M., Yu T.Y., Gopalsamy S., Ito Y., Soni B. Geometry and mesh generation for high fidelity computational simulations using non-uniform rational B-splines. *Applied Numerical Mathematics*, 55(3):368–381, 2005.

Shim M. B., Gunay M., Shimada K. Three-dimensional shape reconstruction of abdominal aortic aneurysm. *CAD Computer Aided Design*, 41:555-565, 2009.

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.

Siegel R. and Sparrow E.M. Transient Heat Transfer for Laminar Forced Convection in the Thermal Entrance Region of Flat Ducts. *Journal of Heat Transfer*, February:29-36, 1959.

Sood B.G., Shen Y., Latif Z., Galli B., Dawe E.J., Haacke E.M. Effective aerosol delivery during high-frequency ventilation in neonatal pigs. *Respirology*, 15:551-555, 2010.

Sorenson R.L. and Steger J.L. Numerical generation of two-dimensional grids by the use of Poisson equations with grid control at boundaries. *WNGG –NASA*, 449, 1980.

Sparis P.D. A method for generating boundary-orthogonal curvilinear coordinate systems using the biharmonic equation. *Journal of Computational Physics*, 61:445-462, 1985.

The Acute Respiratory Distress Syndrome Network. Ventilation with lower tidal volumes as compared with traditional tidal volumes for acute lung injury and the acute respiratory distress syndrome. *New England Journal of Medicine* 342(18):1301-1308, 2000.

Thomas P. D. and Middlecoff J.F. Direct Control of the Grid Point Distribution in Meshes Generated by Elliptic Equations *AIAA Journal*, 18(6):652-656, 1980.

Thompson F.J., Warsi Z.U.A., Mastin C.W. Boundary fitted Coordinate System for Numerical Solution of Partial Differential Equations – A Review. *Journal of Computational Physics*, 47:1-108, 1982.

Thompson F.J., Warsi Z.U.A., Mastin C.W. *Numerical Grid Generation: Foundations and Applications*. North-Holland, Elsevier, 1985 .

- Thompson F.J., Weatherill P., Soni B. *Handbook of grid generation*. Boca Ration.CRC Press, 1999.
- Trachet B., Renard M., De Santis G., Staelens S., De Backer J., Antiga L., Loeys B., Segers P. An integrated framework to quantitatively link mouse-specific hemodynamics to aneurysm formation in angiotensin II-infused ApoE $-/-$ mice. *Annals of Biomedical Engineering*, 39(9):2430-44, 2011.
- 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.
- Vinchurkar S. and Longest W.P. Evaluation of hexahedral, prismatic and hybrid mesh styles for simulating respiratory aerosol dynamics. *Computers and Fluids*, 37:317-331, 2008.
- Watson E.J. Diffusion in oscillatory pipe flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 133:233-244, 1983.
- Weibel E. *Morphometry of the human lung*. Springer-Verlag, 1963.
- Weingarten V. I. The controversy over hex or tet meshing. *Machine Design*, 18:74–78, 1994.
- Wolters B.J., Rutten M.C., Schurink G.W., Kose U., de Hart J., van de Vosse F.N. A patient-specific computational model of fluid-structure interaction in abdominal aortic aneurysms. *Medical Engineering and Physics*, 27:871-883, 2005.
- Xi J. and Longest W.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 W.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.
- Zhang Z. and Kleinstreuer C. Transient airflow structures and particle transport in a sequentially branching lung airway model. *Physics of Fluids*, 14:862-880, 2002.
- 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.