

## ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

## ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΕ ΠΝΕΥΜΟΝΙΚΕΣ ΡΟΕΣ

Υπό

## ΓΡΗΓΟΡΗΣ ΜΑΜΠΛΕΚΟΣ

## ΑΛΕΞΑΝΔΡΑ ΣΚΡΕΚΑ

Επιβλέπων καθηγητής: Βασίλης Μποντόζογλου

## Διπλωματική εργασία

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των απαιτήσεων για την απόκτηση του Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού

Βόλος, 2021

© 2021 Γρηγόρης Μαμπλέκος και Αλεξάνδρα Σκρέκα

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/32 αρ. 202 παρ. 2).

## Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής	Δρ. Βασίλης Μποντόζογλου
(Επιβλέπων)	Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Δεύτερος Εξεταστής	Δρ. Νικόλαος Ανδρίτσος
	Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Τρίτος Εξεταστής	Δρ. Αλέξης Κερμανίδης
	Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

#### Ευχαριστίες

Πρώτα από όλα, θα θέλαμε να ευχαριστήσουμε τον επιβλέποντα της διπλωματικής μας εργασίας, Καθηγητή Βασίλη Μποντόζογλου για την εξαιρετική καθοδήγηση και υποστήριξη του καθόλη την διάρκεια της συνεργασίας μας. Ακόμη, θα θέλαμε να ευχαριστήσουμε τους Καθηγητές Νικόλαο Ανδρίτσο και Αλέξη Κερμανίδη για την μελέτη της εργασίας μας. Τέλος, ευχαριστούμε την οικογένεια μας για την υποστήριξη τους σε όλη μας την προσπάθεια να επιτύχουμε τους στόχους μας.

Γρηγόρης Μαμπλέκος Αλεξάνδρα Σκρέκα

## ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΕ ΠΝΕΥΜΟΝΙΚΕΣ ΡΟΕΣ

# ΓΡΗΓΟΡΗΣ ΜΑΜΠΛΕΚΟΣ

## ΑΛΕΞΑΔΝΡΑ ΣΚΡΕΚΑ

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 2021 Επιβλέπων καθηγητής: Δρ. Βασίλης Μποντόζογλου, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

#### Περίληψη

Τα τελευταία χρόνια, η χορήγηση ιατροφαρμακευτικών αερολυμάτων αποτελεί όλο και συχνότερη θεραπεία για τα αναπνευστικά προβλήματα. Προκειμένου να βελτιστοποιηθεί η αποτελεσματικότητα αυτών των θεραπειών, έχουν αναπτυχτεί μοντέλα για την μελέτη αυτών, που στοχεύουν κυρίως στην πρόβλεψη της εναπόθεσης σωματιδίων στον πνεύμονα.

Στόχος αυτής της διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη και η ανάλυση των πνευμονικών ροών, καθώς και η μοντελοποίηση αυτών με την χρήση αριθμητικών σχημάτων. Βασικό πεδίο μελέτης αποτελεί και η μεταφορά και η εναπόθεση των σωματιδίων στα διάφορα σημεία του πνεύμονα, δηλαδή στους αεραγωγούς και τις κυψελίδες αυτού.

Συγκεκριμένα, θεωρήθηκε ότι η μοντελοποίηση ροής αέρα και μεταφοράς σωματιδίων είναι μεταβατική και μονοδιάστατη, δηλαδή διακριτοποιεί τον χρόνο και το βάθος του πνεύμονα. Καινοτομία αυτής της προσομοίωσης είναι η ανάλυση της συγκέντρωσης σωματιδίων σε επίπεδο κυψελίδας, με βάση την παραδοχή πλήρους (χαοτικής) ανάμιξης. Προς το σκοπό αυτό, υπολογίστηκε η κατανομή κυψελίδων ανά γενιά, με βάση τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των αεραγωγών και το ποσοστό κάλυψης σε κυψελίδες, Το μοντέλο υλοποιήθηκε με την μέθοδο των πεπερασμένων όγκων.

## SIMULATION OF PARTICLE TRANSPORT AND DEPOSITION IN PULMONARY FLOWS

#### GRIGORIS MAMPLEKOS

#### ALEXANDRA SKREKA

Department of Mechanical Engineering, University of Thessaly, 2021 Supervisor: Dr. Vasilis Bontozoglou, Department of Mechanical Engineering, University of Thessaly

#### Abstract

The past years, the administration of medical aerosols has become an increasingly common treatment for respiratory system problems. In order to optimize the effectiveness of these therapies, models have been developed to study them, which their dominant aim is the prediction of particle deposition in human lungs.

Target of current thesis is the investigation and analysis of pulmonary flows, as well as their modeling by using numerical methods. The chief field of research is the transport and deposition of particles in various parts of human lungs, particularly in airways and alveoli.

In specific, it was considered that the modelling of air flow and particle transport is transient and one-dimensional by assuming discrete time and depth of lungs. A novelty of this simulation is the analysis of the particle concentration at the alveoli level, placed on the assumption of complete (chaotic) mixing. For this purpose, the distribution of alveoli per generation was computed, depended on geometric characteristics of airways and their percentage of coverage in alveoli. This model was implemented by the method of finite volume.

## Πίνακας περιεχομένων

Κεφάλαιο 1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ	9
Κεφάλαιο 2. ΑΝΑΛΥΣΗ ΑΝΑΠΝΕΥΣΤΙΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ	13
2.1 Αναπνοή	13
2.2 Δομή αναπνευστικού συστήματος	14
2.2.1 Βασικές περιοχές αναπνευστικού συστήματος	15
2.3 Όγκος πνεύμονα και ρυθμός ροής αέρα	22
2.3.1 Σπιρομέτρηση	24
2.4 Χαρακτηριστικά ροής αέρα και σωματιδίων	28
2.4.1 Απεικονίσεις ροϊκών γραμμών αέρα	29
2.4.2 Τροχιά σωματιδίων	32
Κεφάλαιο3. ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΑΝΑΠΝΕΥΣΤΙΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ	
3.1 Απλοποίηση προβλήματος	36
3.1.1 Μοντέλο Weibel Α	36
3.1.2 Μοντέλο Τρομπέτας (Trumpet Model)	39
3.1.3 Γεωμετρικά μεγέθη μοντέλου Weibel Α	40
3.2 Εναπόθεση σωματιδίων	42
3.2.1 Πιθανότητες εναπόθεσης σωματιδίων	43
3.2.2 Συμπεριφορά σωματιδίου σε ρευστό	45
3.2.3 Μηχανισμοί Εναπόθεσης	48
3.3 Μεταβολή ροής αέρα και γεωμετρίας πνεύμονα	55
3.4 Ογκομετρική παροχή αεραγωγών και κυψελίδων	57
3.5 Εξισώσεις διατήρησης μάζας στην εισπνοής και εκπνοή	61
3.6 Υπολογισμός κατανομής κυψελίδων	66
Κεφάλαιο 4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ	69
4.1 Πεπερασμένοι Όγκοι Ελέγχου	69
4.2 Διακριτοποίηση μερικών τυπικών προβλημάτων	71
4.3 Χωρική Διακριτοποίηση	82
4.4 Χρονική Διακριτοποίηση	85
4.5 Διακριτοποίηση εξισώσεων για εισπνοή στους αεραγωγούς	86
4.6 Διακριτοποίηση εξισώσεων για την εισπνοή στις κυψελίδες	96
4.7 Εκπνοή	
4.7.1 Διακριτοποίηση εξισώσεων στους αεραγωγούς για την εκπνοή	100

4.7.2 Διακριτοποίηση εξισώσεων στις κυψελίδες για την εκπνοή	107
Κεφάλαιο 5. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ-ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	110
5.1 Σύνοψη-Μελλοντικοί στόχοι	112
Βιβλιογραφία	113

## Κεφάλαιο 1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Ο άνθρωπος σε καθημερινή βάση εισπνέει δισεκατομμύρια σωματίδια από τον ατμοσφαιρικό αέρα μέσω της αναπνοής. Αρκετά από αυτά τα σωματίδια αποτελούν τοξικές και βλαβερές ουσίες για τον ανθρώπινο οργανισμό όταν το μέγεθος τους είναι μικρότερο των 10 μm. Αυτό συμβαίνει διότι σωματίδια όλο και μικρότερης διαμέτρου επικάθονται στους ιστούς και τα εσωτερικά τοιχώματα του σώματος, με αποτέλεσμα να παρεμποδίζουν την ομαλή λειτουργία του οργανισμού.

Παρ 'όλα αυτά, ο ρόλος της επικάθισης δεν αφορά μόνο τα βλαβερά σωματίδια που εισπνέονται από την ατμόσφαιρα, αλλά και σωματίδια μη τοξικά που έχουν δημιουργεί από επιστήμονες προκειμένου να ανιχνεύουν τυχόν παθήσεις, καθώς και να καταστέλλουν ή να θεραπεύουν δυσλειτουργίες, κυρίως στο αναπνευστικό σύστημα. Αυτά τα μη τοξικά σωματίδια έχουν τοποθετηθεί μέσα σε ιατροφαρμακευτικές συσκευές, σε μορφή αερολύματος (διάλυμα σωματιδίων εγκλωβισμένων σε όγκο αέρα), και ο ασθενής έχει την δυνατότητα να τα εισπνέει μέσω αυτών των συσκευών ως θεραπεία στην ασθένεια του.

Όταν ο ασθενής εισπνέει, το φάρμακο μεταφέρεται γρήγορα και άμεσα στις αναπνευστικές οδούς και βαθιά μέσα στους πνεύμονες για να ανακουφίσει τα συμπτώματα. Εκτός ως μια γρήγορη διαδικασία, τα αερολύματα υπερτερούν σε ασφάλεια και προβλεψιμότητα της αποτελεσματικότητας τους συγκριτικά με άλλες μεθόδους χορήγησης φαρμάκων, όπως ενδοφλέβια ή στοματικά.



Σχήμα 1.1 : Χορήγηση εισπνεόμενου φαρμάκου

Για τους παραπάνω λόγους, τις τελευταίες δεκαετίες οι επιστήμονες και οι βιομηχανίες φαρμάκων ασχολούνται όλο και περισσότερο με προσομοιώσεις και υπολογιστικά μοντέλα που αφορούν την μελέτη της μεταφοράς και της εναπόθεσης σωματιδίων στους πνεύμονες, καθώς και την δημιουργία και την εξέλιξη φαρμακευτικών αγωγών. Ο βασικός τους, δηλαδή, στόχος είναι η σε βάθος κατανόηση της δομής και του τρόπου λειτουργίας του πνεύμονα, της επιρροής που ασκούν τα σωματίδια σε αυτόν, καθώς και της βελτιστοποίησης των θεραπειών με αερολύματα.

Στην βιβλιογραφία υπάρχουν πολλά μοντέλα που προβλέπουν την μεταφορά και την εναπόθεση των σωματιδίων. Σύμφωνα με τον Finlay (2001) τα μοντέλα πρόβλεψης και εναπόθεσης σωματιδίων κατηγοριοποιούνται σε εμπειρικά μοντέλα (empirical models), σε Λαγκραζιανά δυναμικά μοντέλα (Lagrangian dynamical models) και σε Οϊλεριανά δυναμικά μοντέλα (Eulerian dynamical models).

Empirical models	Lagrangian dynamical models	Eulerian dynamical models		
ICRP (1994), Yu et al. (1992), Rudolf et al. (1990), Rudolf et al. (1986), Davies (1982)	Finlay and Stapleton (1995), Darquenne and Paiva (1994), Koblinger and Hofmann (1990), Ferron <i>et al.</i> (1988), Persons <i>et al.</i> (1987), Martonen (1983), Yeh and Schum (1980), Gerrity <i>et al.</i> (1979), ICRP (1966), Beeckmans (1965), Landahl (1950), Findeisen (1935)	Edwards (1995), Scott and Taulbee (1985), Egan and Nixon (1985), Taulbee <i>et al.</i> (1978), Taulbee and Yu (1975)		

Πίνακας 1.1 : Κατηγοριοποίηση μοντέλων (Finlay W.H., 2001)

Τα μοντέλα εναπόθεσης σωματιδίων παρουσιάζουν διαφορές ως προς το πεδίο χρήσης τους. Τα εμπειρικά μοντέλα είναι τα πιο απλά μοντέλα και με μικρότερο υπολογιστικό κόστος. Βασίζονται κυρίως σε αλγεβρικές εξισώσεις, οι οποίες προέκυψαν από πειραματικά δεδομένα και μετρήσεις για συγκεκριμένες κάθε φορά τιμές των παραμέτρων τους, χωρίς βέβαια να συσχετίζουν την κίνηση και την μεταφορά του σωματιδίου με το ρευστό. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τα εμπειρικά μοντέλα να υστερούν ως προς την ακριβή εκτίμηση της πραγματικής κατάστασης του συστήματος. Αντιθέτως, τα δυναμικά μοντέλα υπερτερούν των εμπειρικών, διότι λαμβάνουν υπόψιν την συμπεριφορά των σωματιδίων και του ρευστού και μπορούν να εφαρμοστούν για μεγάλο πλήθος διαφορετικών κάθε φορά συνθηκών. Η βασική διαφορά μεταξύ των Λαγκραζιανών και Οϊλεριανών μοντέλων είναι ότι τα πρώτα θεωρούν ότι το αερόλυμα κινείται με το σύστημα αναφοράς που έχει τεθεί, ενώ τα δεύτερα θεωρούν ότι το αερόλυμα κινείται ως προς ένα ακίνητο σύστημα αναφοράς.

Τόσο τα Λαγκραζιανά όσο και Οϊλεριανά μοντέλα μπορούν να αξιοποιηθούν για την ανάλυση φαινομένων σε μια διάσταση (1D-dimension), αν και τα Οϊλεριανά χρησιμοποιούνται ευρέως για την ανάλυση τρισδιάστατων (3D-dimension) συστημάτων. Στην παρούσα διπλωματική εργασία, η ανάλυση βασίζεται σε μονοδιάστατο Οϊλεριανό σύστημα, με μοναδική του διάσταση την x, οπού x το βάθος καθώς προχωράμε στον πνεύμονα, ξεκινώντας από την τραχεία για x=0.

#### Δομή διπλωματικής εργασίας

Τη συγκεκριμένη διπλωματική εργασία την ακολουθούν παρακάτω τέσσερα κεφάλαια. Το 2° κεφάλαιο αφορά την ανάλυση του αναπνευστικού συστήματος ως προς την δομή του, το φαινόμενο της αναπνοής, τους όγκους από τους οποίους αποτελείται ο πνεύμονας, καθώς και το τι συμβαίνει στην ροή του αέρα που παρασύρει σωματίδια.

Στο 3° κεφάλαιο, πραγματώνεται η μοντελοποίηση του αναπνευστικού συστήματος σύμφωνα με κάποια ήδη υπάρχουσα συστήματα, μοντέλα μελέτης του πνεύμονα. Ακόμη, δίνεται μια λεπτομερή περιγραφή της μεταφοράς και της εναπόθεσης σωματιδίων στον πνεύμονα, καθώς και οι μηχανισμοί που λαμβάνουν χώρα στην εναπόθεση. Τέλος, αναλύονται οι ογκομετρικές παροχές και οι εξισώσεις διατήρησης μάζας αερολύματος στους αεραγωγούς και τις κυψελίδες.

Στο 4° κεφάλαιο, παρουσιάζεται η αριθμητική ανάλυση και οι εξισώσεις μεταφοράς και διατήρησης μάζας, ώστε να υπολογιστεί η συγκέντρωση και η εναπόθεση του φαρμακευτικού αερολύματος σε κάθε σημείο του αναπνευστικού συστήματος. Επιπλέων, παρουσιάζεται μια σύντομη ανάλυση με χρονική και χωρική διακριτοποίηση των εξισώσεων που περιγράφουν την εισπνοή και την εκπνοή.

Στο 5° και τελευταίο κεφάλαιο, παρουσιάζονται κάποια αποτελέσματα και συμπεράσματα βιβλιογραφίας που προσθέτουν κάποιο νόημα σε πραγματικό επίπεδο για την εναπόθεση των σωματιδίων στον πνεύμονα.

## Κεφάλαιο 2. ΑΝΑΛΥΣΗ ΑΝΑΠΝΕΥΣΤΙΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ

Σε αυτό το κεφάλαιο, αρχικά, παρουσιάζεται η διαδικασία της αναπνοής στον ανθρώπινο οργανισμό και στην συνέχεια αναλύεται η δομή του αναπνευστικού συστήματος. Παρουσιάζονται οι διάφοροι όγκοι-χωρητικότητες στους οποίους ο πνεύμονας επιτελεί την λειτουργία του, καθώς και ο τρόπος μέτρησης αυτών των όγκων για την αξιολόγηση της ομαλής λειτουργίας του αναπνευστικού συστήματος. Τέλος, παρουσιάζονται τα χαρακτηριστικά της ροής αέρα και η κίνηση των σωματιδίων με αυτόν.

## 2.1 Αναπνοή

Η αναπνοή χρησιμοποιεί χημικές και μηχανικές διαδικασίες, προκειμένου να μεταφέρει οξυγόνο  $O_2$  σε κάθε κύτταρο του ανθρωπίνου σώματος με σκοπό να απομακρύνει από αυτό το διοξείδιο του άνθρακα  $CO_2$ . Το σώμα μας χρειάζεται οξυγόνο για να εξασφαλίσει την απαιτούμενη ποσότητα ενέργειας για την ομαλή λειτουργία του. Το διοξείδιο του άνθρακα είναι το προϊόν που αποβάλλεται μέσω της διαδικασίας της αναπνοής. Το αναπνευστικό σύστημα, μέσα από τις αναπνευστικές και αγώγιμες ζώνες του, μεταφέρει τον αέρα από το εξωτερικό περιβάλλον του σώματος στον πνεύμονα και εκτελεί ανταλλαγή αερίων ( $O_2$  και  $CO_2$ ) τόσο μέσα στον πνεύμονα όσο και στα κύτταρα του οργανισμού.

#### Εσωτερική και εξωτερική αναπνοή

Ο πνεύμονας τροφοδοτεί οξυγόνο από τον εξωτερικό αέρα του περιβάλλοντος στα κύτταρα μέσω του αίματος και του καρδιοαγγειακού συστήματος, προκειμένου να αποκτήσει ενέργεια. Κατά την εισπνοή, οξυγόνο εισέρχεται στον πνεύμονα και διαχέεται στο αίμα, μεταφέρεται μέσω του αίματος στην καρδιά και η καρδιά λειτουργώντας ως αντλία μεταφέρει το αίμα με το οξυγόνο στα κύτταρα. Την ίδια στιγμή, το διοξείδιο του άνθρακα, που αποβλήθηκε από την διάσπαση σακχάρων στα κύτταρα του σώματος, διαχέεται στο αίμα, μεταφέρεται μέσω τον αίμα, μεταφέρεται μέσω του αίματος στον πνεύμονα και στο σώματος διαχέεται στο αίμα, μεταφέρεται στο αίμα, μεταφέρεται μέσω του σώματος στον που διάσπαση σακχάρων στα κύτταρα του σώματος, διαχέεται στο αίμα, μεταφέρεται μέσω του αίματος στον πνεύμονα και απομακρύνεται από τον οργανισμό κατά την εκπνοή. Η ανταλλαγή αερίων που λαμβάνει χώρα στον πνεύμονα ονομάζεται εξωτερική αναπνοή, ενώ αυτή που επιτελείται στα κύτταρα εσωτερική.



Σχήμα 2.1 : Ανταλλαγή αερίων

## 2.2 Δομή αναπνευστικού συστήματος

Από μηχανικής άποψης, η γεωμετρία του αναπνευστικού συστήματος δεν είναι πλήρως γνωστή και κατανοητή για τους επιστήμονες που την μελετάνε. Αυτή η έλλειψη γνώσης οφείλεται κυρίως σε δύο λόγους. Ο βασικότερος είναι ότι η ανατομία του αναπνευστικού συστήματος αποτελείται από ποικίλες και διαφορετικές μεταξύ τους λεπτομέρειες, που διαφέρουν ακόμα και από οργανισμό σε οργανισμό, στα διάφορα μέρη μέσα στον πνεύμονα (αγωγοί και κυψελίδες). Ακόμη, οι διαδικασίες που επιτελούνται κατά την αναπνοή είναι χρονικά και χωρικά μεταβαλλόμενες, πράγμα που σημαίνει ότι οι συνθήκες λειτουργίας κάθε φορά μεταβάλλονται και δυσχεραίνεται η ακριβής μελέτη του συστήματος.

Παρ 'όλη την έλλειψη γνώσεων και πληροφοριών, είναι γνωστά τα βασικά χαρακτηριστικά και οι περιοχές του αναπνευστικού συστήματος και έχουν αναπτυχθεί μερικά απλά μοντέλα για την περιγραφή του.

## 2.2.1 Βασικές περιοχές αναπνευστικού συστήματος

Το αναπνευστικό σύστημα αποτελείται από τρεις βασικές περιοχές:

- Εξωθωρακική περιοχή (extrathoracic region)
- Τραχειοβρογχική περιοχή (trachea-bronchial region)
- Κυψελιδική περιοχή (alveolar region)

Συνήθως, η τραχειοβρογχική μαζί με την κυψελιδική περιοχή αποτελούν τον πνεύμονα.



## The Respiratory System

Σχήμα 2.2 : Το ανθρώπινο αναπνευστικό σύστημα

## Εξωθωρακική περιοχή

Η εξωθωρακική περιοχή βρίσκεται στην αρχή του αναπνευστικού συστήματος, κοντά της τραχείας και αποτελείται από τα εξής μέρη:

- Στοματική κοιλότητα (oral or buccal cavity), δηλαδή το στόμα
- Ρινική κοιλότητα (nasal cavity), δηλαδή την μύτη
- Λάρυγγας (larynx), ο οποίος βρίσκεται λίγο πριν την αρχή της τραχείας.
  Εκτός από τις φωνητικές χορδές στον λάρυγγα βρίσκεται η επιγλωττίδα, η οποία «κλείνει» κατά την κατάποση εμποδίζοντας τροφή και υγρά να εισέλθουν στον πνεύμονα.
- Φάρυγγας (pharynx), που διαχωρίζεται στο τμήμα του λαιμού μεταξύ του λάρυγγα και του στόματος (oropharynx) ή μεταξύ του λάρυγγα και της μύτης (nasopharynx). Το πρώτο τμήμα που αφορά τον λάρυγγα και το στόμα ονομάζεται οισοφάγος από όπου «περνά» η τροφή και τα υγρά που θα καταλήξουν στο πεπτικό σύστημα, δηλαδή το στομάχι. Αντιθέτως, το δεύτερο τμήμα που αφορά τον λάρυγγα και τη μύτη αποτελεί μια επιπλέον, εκτός του στόματος, «δίοδος» αέρα κατά την αναπνοή. Συχνά, λέμε ότι ο φάρυγγας μαζί με τον λάρυγγα αποτελούν τον λαιμό.



Σχήμα 2.3 : Εξωθωρακική περιοχή

## Τραχειοβρογχική περιοχή

Η τραχειοβρογχική περιοχή (trachea-bronchial region) αποτελείται από αεραγωγούς που μεταφέρουν τον αέρα από τον λάρυγγα έως τα τμήματα του πνεύμονα που επιτελείται ανταλλαγή αερίων (gas exchange regions). Αρχικά, ο αέρας συναντά την τραχεία (tranchea), η οποία αποτελεί την μηδενική γενειά. Ακριβώς μετά την τραχεία ο πνεύμονας διχοτομείται σε δύο αεραγωγούς, οι οποίοι ονομάζονται πρωτεύοντες βρόγχοι (primary bronchi). Οι πρωτεύοντες διχοτομούνται στους δευτερεύοντες βρόγχους (lobar bronchi) και οι τελευταίοι αντίστοιχα στους τριτογενείς βρόγχους (segmental bronchi).

Οι δευτερεύοντες βρόγχοι ορίζουν τα διάφορα τμήματα του πνεύμονα, τα οποία ονομάζονται λοβοί (lobes). Στο αριστερό τμήμα του πνεύμονα υπάρχουν δύο λοβοί ενώ στο δεξί τρείς. Αυτή διάταξη προκύπτει εξαιτίας του γεγονότος ότι υπάρχουν δύο δευτερεύοντες βρόγχοι στο αριστερό και τρείς αντίστοιχα στο δεξί τμήμα του πνεύμονα.



Σχήμα 2.4 : Τραχειοβρογχική περιοχή



Σχήμα 2.5 : Λοβοί (lobes)

Στη συνέχεια, οι τριτογενείς βρόγχοι διχοτομούνται σε μικρότερα τμήματα, που ονομάζονται βρογχοπνευμονικά (bronchopulmonary segments). Τα βρογχοπνευμονικά διχοτομούνται σε αεραγωγούς, που ονομάζονται βρογχιόλια (bronchioles), εκ των οποίων οι αεραγωγοί της τελευταίας γενειάς ονομάζονται «τερματικά βρογχιόλια» (terminal bronchioles). Ο αέρας μεταφέρεται από την τραχέα, τους βρόγχους και καταλήγει στα βρογχιόλια της τελευταίας γενειάς.

## Σημαντική λειτουργία τραχείας και βρογχιολίων

Οι αεραγωγοί της τραχειοβρογχικής περιοχής επικαλύπτονται στα τοιχώματα τους από «μικρές τρίχες», τις λεγόμενες βλεφαρίδες (cilia). Οι βλεφαρίδες έρχονται σε επαφή και εκτελούν συγχρονισμένη κίνηση με στρώμα βλέννας (mucous layer), όπου επικάθεται μεγάλο μέρος των εισπνεόμενων της ατμόσφαιρας σωματιδίων. Μέσω του λαιμού καταπίνεται ή αποχρέμπτεται μέρος της βλέννας αυτής με τα σωματίδια.

Ο μηχανισμός αυτός βοηθάει στη διατήρηση του πνεύμονα «καθαρού» από επιβλαβή σωματίδια, όπως σκόνη, που πιθανόν να περιέχονται στον ατμοσφαιρικό αέρα που εισπνέεται. Παρ' όλα αυτά, τα μικρότερα σε μέγεθος σωματίδια (διαμέτρου μερικών μικρομέτρων) δεν καταφέρνουν να απομακρυνθούν από τον οργανισμό και παραμένουν στα τοιχώματα των αεραγωγών, με αποτέλεσμα να προκαλούν δυσλειτουργία στην ομαλή λειτουργιά του πνεύμονα, όπως δύσπνοια, βήχα και αναπνευστικά προβλήματα.



Σχήμα 2.6 : Βλεφαρίδες (cilia)

## Κυψελιδική περιοχή

Τα τερματικά βρογχιόλια διχοτομούνται σε ακόμη μικρότερους αεραγωγούς, οι οποίοι αποτελούν την κυψελιδική περιοχή (alveolar region), περιοχή η οποία επικαλύπτεται με κυψελίδες (alveoli). Οι αεραγωγοί με τις κυψελίδες τους αποτελούν τα «αναπνευστικά βρογχιόλια» (respiratory bronchioles). Προχωρώντας βαθύτερα στον πνεύμονα, οι αεραγωγοί της κυψελιδικής περιοχής, «κυψελιδικοί αγωγοί» (alveolar ducts), κάθε επόμενης γενιάς καλύπτονται με όλο και περισσότερες κυψελίδες, έως ότου καταλήξουμε σε αεραγωγούς οι οποίοι επικαλύπτονται εξ' ολοκλήρου από αυτές. Στη τελευταία γενιά της κυψελιδικής περιοχής βρίσκονται οι κυψελιδικοί (alveolar sacs).



Σχήμα 2.7 : Κυψελιδικοί σάκοι (alveolar sacs)

## Μορφολογία και λειτουργία κυψελίδων

Οι κυψελίδες (alveoli) είναι μικροσκοπικοί σάκοι αέρα στον πνεύμονα, οι οποίοι βρίσκονται γύρω από τους αεραγωγούς των τερματικών βρογχιολίων. Αν και είναι μικροσκοπικές, με μέση διάμετρο 200 μm, ο ρόλος του είναι στην αναπνοή είναι ο σημαντικότερος.

Ο μέσος αριθμός κυψελίδων στο ανθρώπινο σώμα είναι 480 εκατομμύρια (διακύμανση 274-790 εκατομμύρια κυψελίδες), οι οποίες διαστέλλονται κατά την εισπνοή αποθηκεύοντας το οξυγόνο και συστέλλονται κατά την εκπνοή, καθώς αποβάλλουν το διοξείδιο του άνθρακα. Το σχήμα της κάθε κυψελίδας θυμίζει το σχήμα μιας «ρόγας σταφυλιού» και η συνολική μέση επιφάνεια που καλύπτουν οι κυψελίδες είναι 70 m<sup>2</sup>.

Όσον αναφορά τους αγωγούς (τραχεία, βρογχιόλια, κυψελιδικοί αγωγοί) υπάρχουν περίπου 17 εκατομμύρια στον ανθρώπινο πνεύμονα. Το συνολικό μέσο μήκος τους φτάνει τα 9 km, αλλά η διάταξή τους είναι τέτοια ώστε η μέση απόσταση μεταξύ στόματος και κυψελίδων δεν ξεπερνά τα 20-40 cm (Weibel et al. 2005).



Σχήμα 2.8 : Κυψελίδες



Σχήμα 2.9 : Αγωγός με τις κυψελίδες του μέσα από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο

## 2.3 Όγκος πνεύμονα και ρυθμός ροής αέρα

Οι όγκοι στον πνεύμονα χωρίζονται με βάση την χωρητικότητα που καταλαμβάνουν στον πνεύμονα. Χωρίζονται σε στατικούς και δυναμικούς όγκους. Οι βασικότεροι όγκοι (Quanjer at al. 1993) που μας ενδιαφέρουν στην παρούσα διπλωματική εργασία είναι οι παρακάτω:

- TV (Tidal Volume): Είναι ο όγκος αέρα που είτε εισπνέεται είτε εκπνέεται κατά την διάρκεια ενός κύκλου αναπνοής, σε κανονικές συνθήκες. Βέβαια ο όγκος αυτός μεταβάλλεται αν αλλάξουν οι συνθήκες κατά την μέτρηση, όπως αν βρισκόμαστε σε κατάσταση ηρεμίας είτε αν εκτελούμε κάποια σωματική άσκηση. Μια μέση τιμή του κύκλου αναπνοής μπορεί να θεωρηθούν οι 6 αναπνοές.
- TLC (Total Lung Capacity): Είναι ο συνολικός όγκος αέρα στον χώρο του πνεύμονα μετά το τέλος μίας μέγιστης και πλήρης εισπνοής.
- FRC (Functional Residual Capacity): Είναι ο λειτουργικά υπολειπόμενος όγκος αέρα που βρίσκεται στον πνεύμονα και τους αεραγωγούς ακριβώς στο τέλος μιας εκπνοής, δηλαδή λίγο πριν την επόμενη εισπνοή, σε κανονικές συνθήκες.
- **RV** (Residual Volume): Είναι ο υπολειπόμενος όγκος αέρα στον πνεύμονα μετά το τέλος μιας μέγιστης και πλήρης εκπνοής.
- VC (Vital Capacity): Είναι ο μέγιστος δυνατός όγκος αέρα που κάποιος μπορεί να εισπνεύσει και μετριέται από την στιγμή που θα εκπνεύσει έως τον υπολειπόμενο όγκο RV μέχρι να εισπνεύσει έως τον συνολικό όγκο αέρα TLC.
- IRV (Inspiratory Reserve Volume): Είναι ο όγκος αέρα που μπορεί κάποιος να εισπνεύσει σε ηρεμία, μετά το τέλος μιας κανονικής και πλήρης αναπνοής.
- ERV (Expiratory Reserve Volume): Είναι ο όγκος αέρα που μπορεί κάποιος να εκπνεύσει, μετά το τέλος μιας κανονικής και πλήρης αναπνοής.
- IC (Inspiratory Capacity): Είναι ο μέγιστος όγκος αέρα που μπορεί να εισπνευσθεί πριν την έναρξη μιας κανονικής και σε ηρεμία εισπνοής (ή μετά το τέλος μιας κανονικής και σε ηρεμία εκπνοής). Δηλαδή από την στιγμή του λειτουργικά υπολειπόμενου όγκου FRC.



Σχήμα 2.10 : Όγκοι πνεύμονα

Σημαντικό ρόλο στην ανάλυση του όγκου και της ροής του αέρα παίζουν και τα εξής χαρακτηριστικά:

- FVC (Forced Vital Capacity): Ο όγκος αέρα που μπορεί κάποιος να εκπνεύσει κατά την διάρκεια μιας εξαναγκασμένης εκπνοής, ξεκινώντας από την θέση μιας μέγιστης και πλήρης εισπνοής καταλήγοντας στην μέγιστη και πλήρη εκπνοή.
- FEV1 (Forced Expiratory Volume in one second): Ο μέγιστος όγκος που μπορεί κάποιος να εκπνεύσει σε ένα δευτερόλεπτο, ξεκινώντας με τον συνολικό όγκο πνεύμονα TLC.
- PEF (Peak Expiratory Flow): Είναι ο μέγιστος ρυθμός ροής εκπνεόμενου αέρα, ο οποίος φαίνεται σε παρακάτω διάγραμμα στην διαδικασία της σπιρομέτρησης.
- *f* (breathing frequency): Είναι η συχνότητα αναπνοής, δηλαδή ο αριθμός των κανονικών αναπνοών ανά λεπτό.

Agc	Tidal volume (l)	Flow rate (1 min <sup>-1</sup> )	Frequency (breaths min <sup>-1</sup> )	
6 months				
sleeping	0.075	4.8	32	
low activity	0.175	6.0	17	
2 years	0.19	8.2	21.6	
4 years	0.23	11.1	24	
8 years	0.325	13	20	
Adult male (with mouthpiece)	0.750	18	12	

Πίνακας 2.1 : Τιμές παραμέτρων της αναπνοής για διάφορες ηλικίες (Finlay W.H., 2001)

## 2.3.1 Σπιρομέτρηση

Οι όγκοι στον πνεύμονα κάθε ανθρώπου μπορούν να μετρηθούν με μια διαδικασία που ονομάζεται σπιρομέτρηση (**spirometry**). Βέβαια, υπάρχουν πολλοί παράμετροι που επηρεάζουν το μέγεθος του πνεύμονα και τους διάφορους όγκους. Κάποιοι από αυτούς είναι το ύψος, το βάρος, η ηλικία, το φύλο, οι συνήθειες (π.χ. κάπνισμα), η φυσική κατάσταση και σε πολλές περιπτώσεις ακόμα η εθνικότητα και ο τόπος κατοικίας.

Η σπιρομέτρηση αποτελεί μια ιατρική εξέταση, που λαμβάνει χώρα κυρίως σε νοσοκομεία και κλινικές, όπου μέσω αυτής μπορεί να εκτιμηθεί η λειτουργική κατάσταση του πνεύμονα και να ανακαλυφθούν τυχόν παθήσεις και δυσλειτουργίες. Η σπιρομέτρηση δεν αφορά μόνο την εύρεση τυχόν καινούργιων δυσλειτουργιών, αλλά και την εκτίμηση της αποτελεσματικότητας των ιατρικών φαρμάκων σε ήδη υπάρχουσες παθήσεις, μέσω της επανεξέτασης με σπιρομέτρηση πριν και μετά την χορήγηση δόσης φαρμάκου.

Η διαδικασία της σπιρομέτρησης είναι ακίνδυνη. Ο ασθενής καλείται να εισπνεύσει όσο μεγαλύτερη ποσότητα αέρα δύναται και έπειτα να εκπνεύσει αυτή την ποσότητα όσο πιο δυνατά γίνεται για συγκεκριμένο χρονικό διάστημα δευτερολέπτων. Το σπιρόμετρο μπορεί και μετρά με ακρίβεια την ροή του αέρα μέσα στον πνεύμονα και το χρόνο στον οποίο αυτό συμβαίνει. Μετά την εξέταση, μέσω της σπιρομέτρησης εξάγονται αποτελέσματα με την μορφή διαγραμμάτων, τα οποία λαμβάνουν τις εξής μορφές:

- Καμπύλη Ογκομετρικής παροχής (Flow rate) Όγκου αέρα (Volume), με την παροχή στον κατακόρυφο y-άξονα και τον όγκο στον οριζόντιο xάξονα.
- Καμπύλη Όγκου αέρα (Volume) Χρόνου (Time), με όγκο στον κατακόρυφο y-άξονα και τον χρόνο στον οριζόντιο x-άξονα.



Σχήμα 2.11: Γραφική απεικόνιση ογκομετρικής παροχής με όγκο αέρα



Σχήμα 2.12: Γραφική απεικόνιση όγκου αέρα με χρόνο

#### Επιπλοκές

Κατά την σπιρομέτρηση, οι ασθενείς παρουσιάζουν διαφοροποιήσεις όσο αναφορά τα αποτελέσματα. Η σύγκριση των αποτελεσμάτων γίνεται με ήδη υπάρχουσα αποτελέσματα και διαγράμματα από μετρήσεις που έχουν προηγηθεί στο παρελθόν και καθιστούν τα πρότυπα μοντέλα του μέσου ανθρώπου ανάλογα με την ηλικία, το φύλλο, το βάρος, την εθνικότητα, την φυσική κατάσταση και τυχόν παθήσεις. Με αυτόν τον τρόπο γίνεται η σύγκριση των αποτελεσμάτων του ασθενή με τα ήδη πρότυπα μοντέλα και εξάγονται τα συμπεράσματα ως προς τη φυσιολογική και μη λειτουργία του πνεύμονα του.

Μερικά διαγράμματα στις περιπτώσεις παθήσεων και δυσλειτουργίας του πνεύμονα είναι τα εξής:



Σχήμα 2.13 : Σύγκριση όγκου αέρα μεταξύ «normal» και «obstructive»



Σχήμα 2.14: Σύγκριση ογκομετρικής παροχής μεταξύ «normal» και «obstructive»



Σχήμα 2.15 : Σύγκριση όγκου αέρα μεταξύ «normal» και «restrictive»



Σχήμα 2.16: Σύγκριση ογκομετρικής παροχής μεταξύ «normal» και «restrictive»

Στα παραπάνω διαγράμματα παρουσιάζονται οι δυο κατηγορίες επιπλοκώναποκλίσεων από την φυσιολογική λειτουργία του πνεύμονα. Αυτές ονομάζονται στην αγγλική βιβλιογραφία «obstructive» και «restrictive». Μεταξύ τους υπάρχουν κάποιες διαφοροποιήσεις όσον αναφορά τις περιπτώσεις τις οποίες ένας ασθενής παρουσιάζει την ανάλογη συμπεριφορά των καμπυλών.

Στην κατηγορία «obstructive» ανήκουν οι ασθενείς των πιο σοβαρών δυσλειτουργιών, όπως ασθενείς με άσθμα και χρόνια φλεγμονή (COPD: Chronic obstructive pulmonary disease) στο αναπνευστικό σύστημα, οι οποίοι υπόκεινται σε

ιατροφαρμακευτική αγωγή. Από την άλλη πλευρά, στην κατηγορία «restrictive» ανήκουν οι ασθενείς που παρουσιάζουν δυσκολία στην αναπνοή και στην ομαλή λειτουργία του πνεύμονα, κυρίως λόγω του βάρους (π.χ. παχυσαρκία), στρέβλωσης της θέσης της σπονδυλικής στήλης (π.χ. σκολίωση) ή μυϊκά αδύναμου πνεύμονα, πρόβλημα που προκύπτει είτε εκ γενετής είτε κακών συνηθειών (π.χ. κάπνισμα) και κακής φυσικής κατάστασης. Υπάρχουν και ασθενείς που παρουσιάζουν και ένα συνδυασμό δυσλειτουργιών τόσο της κατηγορίας «obstructive» όσο και «restrictive».

#### 2.4 Χαρακτηριστικά ροής αέρα και σωματιδίων

Στόχος των επιστημόνων τις τελευταίες δεκαετίες είναι η μελέτη της κίνησης του αέρα μέσα στον πνεύμονα, καθώς και η μεταφορά και η εναπόθεση των σωματιδίων μέσα στους αεραγωγούς και στις κυψελίδες αυτού. Οι παράμετροι που επηρεάζουν τη μεταφορά και την εναπόθεση των σωματιδίων σχετίζονται κυρίως με το μέγεθος και το σχήμα του σωματιδίου, με τον όγκο, τον χρόνο και την ροή του εισπνεόμενου αέρα, καθώς επίσης και με τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των αεραγωγών και κυψελίδων του πνεύμονα.

Η μεγαλύτερη μελέτη της εναπόθεσης είναι επικεντρωμένη σε ό,τι αφορά τις κυψελίδες και την ροή αέρα μέσα σε αυτές. Έχει αποδειχτεί ότι το κλάσμα των εισπνεόμενων σωματιδίων που τελικά καταλήγει να επικάθεται στα τοιχώματα των κυψελίδων εξαρτάται από τον τρόπο που αναμειγνύεται ο εισπνεόμενος αέρας με τον αέρα που περιέχεται ήδη στις κυψελίδες.

Αρχικά, στην κυψελιδική περιοχή είχε υποτεθεί από τον Taylor το 1960 ότι η ροή αέρα είναι αντιστρεπτή, καθώς είχε θεωρηθεί ότι η κίνηση στα τοιχώματα είναι αντιστρεπτή εξαιτίας των χαμηλών τιμών Reynolds ( Re<<1). Στην πορεία αποδείχτηκε ότι μια τέτοια εικασία οδηγούσε σε λανθασμένα αποτελέσματα.

Παρατηρήθηκε ότι η ροή μέσα στις κυψελίδες γίνεται χαοτική, άρα και μη αντιστρεπτή, ασχέτως το αν επικρατούν χαμηλές ταχύτητες και αντίστοιχα χαμηλές τιμές Reynolds. O Tsuda, Henry και Butler ήταν οι πρωτοπόροι που διαμόρφωσαν τις κατάλληλες προϋποθέσεις για τη δημιουργία προσομοιώσεων που περιέγραφαν με μεγαλύτερη ακρίβεια την ροή μέσα στον πνεύμονα λαμβάνοντας υπόψιν τις λεπτομέρειες της δομής του πνεύμονα.

Η χαοτική ανάμιξη στις κυψελίδες αποδείχτηκε ότι είναι αποτέλεσμα της επίδρασης της αξονικής (εμβολικής) ροής λόγω συστολών/διαστολών των αεραγωγών και της

ανακυκλοφορίας μέσα στις κυψελίδες εξαιτίας της διατμητικής τάσης που υφίστανται αυτές στο άνοιγμα κυψελίδα-αεραγωγός.

Η κάθε κυψελίδα διαστέλλεται με περίπου τον ίδιο ρυθμό, οπότε η ροή που εισέρχεται στις κυψελίδες ( $\dot{Q}_A$ ) θεωρείται σταθερή. Αντιθέτως, η ροή στον αεραγωγό που διέρχεται εφαπτόμενα στο άνοιγμα των κυψελίδων ( $\dot{Q}_D$ ) εξαρτάται από τον διαστελλόμενο όγκο του πνεύμονα, γειτονικού προς την κυψελίδα που μας ενδιαφέρει. Ο λόγος ( $\dot{Q}_A/\dot{Q}_D$ ) είναι αυτός που καθορίζει την ανάμιξη και την εναπόθεση των σωματιδίων. Ο τιμή του λόγου αυτού εξαρτάται από την γεωμετρία του πνεύμονα και όχι από τον ρυθμό αναπνοής, τον όγκο αέρα είτε εισπνέεται είτε εκπνέεται κατά την διάρκεια της αναπνοής (tidal volume) και από τις τιμές του αριθμού Reynolds. Έχει προκύψει ότι όσο μικρότερος σε μέγεθος είναι ο πνεύμονας τόση μεγαλύτερη η ανακυκλοφορία. Όσο μεγαλύτερη η τελευταία, τόσο βαθύτερη η επικάθιση των σωματιδίων.

Πίνακας 2.2: Υπολογισμός  $\dot{Q}_A/\dot{Q}_D$ , Re,Pe,St και α για διαφορετικές γενιές. (Tsuda A, Henry FS, Butler JP, 2008)

Gen.	Re	Pe (5 nm)	Pe (500 nm)	St	α	$Q_{\rm A}/Q_{\rm D}$
15	1,606	126	$3,28 \times 10^{7}$	0.0001	0.04	0.0003
16	0,798	62,5	$1.63 \times 10^{7}$	0,0003	0.04	0.0006
17	0,393	30,8	8,03 × 10 <sup>6</sup>	0,0006	0.04	0.0011
18	0,192	15,03	$3.92 \times 10^{6}$	0,0012	0.04	0.0023
19	0.092	7,20	$1.88 \times 10^{6}$	0,0026	0.04	0.0048
20	0.043	3,37	$8.77 \times 10^{5}$	0.0055	0.04	0.0103
21	0.019	1,46	$3.80 \times 10^{5}$	0.0126	0.04	0.0238
22	0.007	0,53	$1.38 \times 10^{5}$	0.0349	0.04	0.0657
23	0.001	0,10	$2.56 \times 10^{4}$	0,1872	0,04	0,3525

#### 2.4.1 Απεικονίσεις ροϊκών γραμμών αέρα

Η ανακυκλοφορία παίζει πολύ σημαντικό ρόλο, καθώς τα τοιχώματα των κυψελίδων συστέλλονται και διαστέλλονται κατά την αναπνοή με την μη αντιστρέψιμη ροή του αέρα. Θεωρώντας αξονοσυμμετρικό το σύστημα των αεραγωγών που επικαλύπτονται από κυψελίδες, βρίσκεται πόσο η ανακυκλοφορία επηρεάζεται από την τιμή του λόγου  $(\dot{Q}_A/\dot{Q}_D)$ . Ακόμα, έχει αποδειχτεί ότι όταν η ροή αέρα υφίσταται ανακυκλοφορία στο σημείο ροής όπου ξεκινάει το άνοιγμα αγωγού-κυψελίδες πάντα υπάρχει στάσιμο σημείο (stagnation point). Στο στάσιμο σημείο το διάνυσμα της

ταχύτητας του αέρα μηδενίζεται και η πίεση αποκτά την μέγιστη δυνατή για το σύστημα τιμή.

Σημαντικό ρόλο στην ροή αέρα διαδραματίζει και το πόσο βαθιά στον πνεύμονα προχωράμε. Για μικρά βάθη, σημεία όπου πρωτοεμφανίζονται οι κυψελίδες (shallow alveoli), παρατηρείται ελάχιστη έως καθόλου ανακυκλοφορία. Καθώς προχωράμε σε μεγαλύτερα βάθη η ανακυκλοφορία γίνεται όλο και πιο έντονη, μέχρι τελικά να σχηματιστεί μια «ώριμη» κοιλότητα (mature cavity) κυψελίδας με την μέγιστη ανακυκλοφορία αέρα.



Σχήμα 2.17: Στιγμιαίες γραμμές ροής σε θέση μέγιστης εισπνοής σε διαστελλόμενους κυψελιδικούς αγωγούς ίδιου σχήματος, για τρεις διαφορετικές τιμές λόγου  $(\dot{Q}_A/\dot{Q}_D)$ . (Tsuda, A., Henry, F.S., Butler, J.P., 1995)



Σχήμα 2.18: Στιγμιαίες γραμμές ροής σε διαστολή (A) και συστολή (B) αγωγού και απεικόνιση του στάσιμου σημείου (Tsuda, A., Henry, F.S., Butler, J.P., 1995)



Σχήμα 2.19 : Στιγμιαίες γραμμές ροής σε θέση μέγιστης εισπνοής σε διαστελλόμενους κυψελιδικούς αγωγούς με σταθερό Re, σε τρία διαφορετικά βάθη. (Tsuda, A., Henry, F.S., Butler, J.P. ,1995)

## 2.4.2 Τροχιά σωματιδίων

Στις κυψελίδες λόγω του φαινομένου της ανακυκλοφορίας του αέρα και της συστολοδιαστολής των τοιχωμάτων τους επικρατεί χαοτική ροή, που έχει ως αποτέλεσμα να θεωρηθούν οι κυψελίδες ως δοχεία πλήρης ανάμιξης. Αυτό που μας ενδιαφέρει περισσότερο είναι η κίνηση των σωματιδίων μέσα στις κυψελίδες. Η κίνηση και η τροχιά που ακολουθούν τα σωματίδια είναι περίπλοκη και πολλές φορές δύσκολο να υπολογιστεί με ακρίβεια.

Για να αναλυθεί η τροχιά των σωματιδίων παρουσιάζονται δυο νέες συχνότητες οι  $f_1$ και  $f_2$ . Η συχνότητα  $f_1$  έχει άμεση σχέση με την ανακυκλοφορία στις κυψελίδες, ενώ η  $f_2$  προκύπτει εξαιτίας της συστολοδιαστολής των τοιχωμάτων των κυψελίδων. Η  $f_1$ ονομάζεται συχνότητα ανακυκλοφορίας (recirculation frequency), ενώ η  $f_2$ ονομάζεται συχνότητα αναπνοής (breathing frequency).

Αν υποθέταμε ότι τα τοιχώματα των κυψελίδων δεν υφίστανται συστολοδιαστολή τότε επικρατεί μόνο ανακυκλοφορία του αέρα στις κυψελίδες σε κλειστές τροχιές (recirculation orbits). Στο σχήμα 2.20 απεικονίζονται οι κλειστές τροχιές ανακυκλοφορίας σε μια κυψελίδα. Η συχνότητα ανακυκλοφορίας f<sub>1</sub> γίνεται μέγιστη στο κέντρο της κυψελίδας, ενώ μειώνεται όσο προχωράμε προς τα τοιχώματα της κυψελίδας



Σχήμα 2.20: Απεικόνιση της ανακυκλοφορίας στην κυψελίδα. Υπόθεση μη κινούμενων τοιχωμάτων κυψελίδας. (Tsuda, A., Henry, F.S., Butler, J.P., 1995)

Προφανώς, η κίνηση των σωματιδίων επηρεάζεται και αυτή από τις δυο συχνότητες  $f_1$  και  $f_2$ , συγκεκριμένα από τον λόγο  $f_1/f_2$ . Εκτός από την τιμή αυτού του λόγου σημαντικό ρόλο παίζει και αν η ροή είναι διαταραγμένη, δηλαδή αν τα τοιχώματα των κυψελίδων υφίσταται συστολοδιαστολή. Καθώς τα σωματίδια κινούνται, η κίνηση τους αναπαρίσταται σε τροχιές που σχηματίζουν τους λεγόμενους «τόρους» (torus), δηλαδή «σμήνη» σωματιδίων που ακολουθούν διάφορες τροχιές μέσα στην κυψελίδα.

#### Μη-διαταραγμένη ροή

Στην περίπτωση της μη-διαταραγμένης ροής, όταν τα τοιχώματα των κυψελίδων δεν υφίστανται συστολοδιαστολή, ο λόγος συχνοτήτων  $f_1/f_2$  είναι είτε «λογικός» (rational) ή «μη-λογικός» (irrational) αριθμός. Λέμε ότι είναι «λογικός» όταν οι συχνότητες στον αριθμητή και τον παρονομαστή είναι ακέραιοι αριθμοί, ενώ ως «μη-λογικός» όταν δεν είναι ακέραιοι αριθμοί. Η διαφορά ανάμεσα στους «λογικούς» και «μη-λογικούς» λόγους είναι ότι στους πρώτους τα σωματίδια επιστρέφουν στην αρχική τους θέση από όπου ξεκίνησαν να περιστρέφονται μέσα στην κυψελίδα, μετά από κάποιον αριθμό περιστροφών, ενώ στους δεύτερους τα σωματίδια δεν επιστρέφουν στην αρχική τους θέση. Οι «μη-λογικοί» λόγοι μπορούν να χωριστούν σε «επαρκώς μη-λογικούς» και «ανεπαρκώς μη-λογικούς».

#### Διαταραγμένη ροή

Στην περίπτωση της διαταραγμένης ροής, δηλαδή όταν τα τοιχώματα των κυψελίδων υφίσταται συστολοδιαστολή, οι «λογικοί» και οι «ανεπαρκώς μη-λογικοί» λόγοι, άρα και οι αντίστοιχοι «τόροι» τους δεν μπορούν να επιβιώσουν της διαταραχής και η ροή των σωματιδίων γίνεται χαοτική. Μόνο οι «επαρκώς μη-λογικοί» τόροι διατηρούν την πορεία τους. Η χαοτική κίνηση, όπως έχει ήδη αναφερθεί δημιουργεί περίπλοκες και πεπλεγμένες τροχιές στα σωματίδια.



Σχήμα 2.21: <u>Πάνω:</u> Τρεις τόροι χωρίς διαταραχή, με κόκκινο χρώμα ο εξωτερικός και εσωτερικός (μη λογικοί) και με γκρι ο μεσαίος (λογικός).

<u>Μέση</u>: Οι τρεις τόροι μετά τη διαταραχή, ο λογικός τόρος έχει αντικατασταθεί με μπλέ σωληνοειδή στερεό. (Tsuda, Laine-Pearson, Hydon, 2011)



Σχήμα 2.22: <u>Πάνω:</u> Πέντε τόροι χωρίς διαταραχή, με πράσινο, κόκκινο, κίτρινο χρώμα μη λογικοί και με μωβ, μπλε λογικοί

<u>Μέση</u>: Οι πέντε τόροι μετά τη διαταραχή (Tsuda, Laine-Pearson, Hydon, 2011)

#### Γραφήματα Poincare

Μια ακόμα μέθοδος απεικόνισης της τροχιάς των σωματιδίων είναι τα γραφήματα Poincare. Στα γραφήματα Poincare φαίνονται το ίχνος της θέσης ενός ή και περισσοτέρων σωματιδίων μέσα στον κυψελιδικό χώρο. Πάλι, όπως και στους «τόρους», παίζει σημαντικό ρόλο ο λόγος των συχνοτήτων  $f_1/f_2$ .

Για τους «λογικούς» λόγους  $f_1/f_2$ , η τροχιά στο γράφημα Poincare εμφανίζεται ως ομάδα περιοδικών σημείων που εξαρτώνται από την αρχική τους θέση. Αντιθέτως, για τους «μη-λογικούς» λόγους, το γράφημα αποτελείται από άπειρα μη-περιοδικά σημεία για οποιοδήποτε αρχικό σημείο. Σημαντικό ρόλο, όπως και προηγουμένως, διαδραματίζει και όποια τυχόν διαταραχή υφίσταται η κυψελίδα. Στο σχήμα 2.23 φαίνονται οι δυο περιπτώσεις με και χωρίς διαταραχή στην κυψελίδα. Τα διάφορα χρώματα υποδηλώνουν και μια διαφορετική τροχιά. Χαρακτηριστικό της χαοτικής ροής στην περίπτωση της διαταραγμένης ροής είναι η δημιουργία «νήσων» σωματιδίων (islands).



Σχήμα 2.23: <u>Αριστερά</u>: οι τροχιές των σωματιδίων εν απουσία κίνησης τοιχώματος. <u>Δεζιά</u>: Η προσθήκη διαταραχής δημιουργεί νήσους. (Tsuda, Laine-Pearson, Hydon, 2011)

## Κεφάλαιο3. ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΑΝΑΠΝΕΥΣΤΙΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ

Εφόσον πραγματοποιηθούν κάποιες παραδοχές για την απλοποίηση του προβλήματος, παρουσιάζεται η μοντελοποίηση του αναπνευστικού συστήματος σύμφωνα με κάποια ήδη υπάρχουσα συστήματα μοντέλα μελέτης του πνεύμονα. Επιπλέων, περιγράφεται η μεταφορά και η εναπόθεση των σωματιδίων και οι αντίστοιχοι μηχανισμοί της εναπόθεσης. Τέλος, αναλύονται οι ογκομετρικές παροχές και οι συγκεντρώσεις αέρα στους αεραγωγούς και τις κυψελίδες.

## 3.1 Απλοποίηση προβλήματος

Προκειμένου να χρησιμοποιηθούν τα μοντέλα ανάλυσης του αναπνευστικού συστήματος έχουν γίνει κάποιες παραδοχές για την απλοποίηση του προβλήματος. Η απλοποίηση του προβλήματος κρίθηκε αναγκαία, διότι η γεωμετρία και η δομή του αναπνευστικού συστήματος είναι ιδιαίτερα πολύπλοκη και η γνώση αυτών όχι πλήρως επαρκή. Η έλλειψη γνώσης, όπως έχει ήδη αναφερθεί, οφείλεται κυρίως σε δύο λόγους· στην ποικίλη ανατομία του αναπνευστικού συστήματος που διαφέρει από οργανισμό σε οργανισμό και στις διαδικασίες που επιτελούνται κατά την αναπνοή, οι οποίες είναι χρονικά και χωρικά μεταβαλλόμενες.

Για τους παραπάνω λόγους, η περιγραφή του αναπνευστικού συστήματος γίνεται μέσων απλουστευμένων μοντέλων. Τα μοντέλα αυτά αφορούν τόσο τρισδιάστατη περιγραφή της δομής του συστήματος όσο και μονοδιάστατη. Όσον αναφορά την τρισδιάστατη ανάλυση, έχουν πραγματοποιηθεί αρκετές μελέτες και προσεγγίσεις του συστήματος. Βέβαια, τα αποτελέσματα που προέκυψαν δεν περιέγραφαν πλήρως και με λεπτομέρεια το τι ακριβώς συμβαίνει στις δομές του πνεύμονα. Για αυτό το λόγο, και για μεγαλύτερη ευκολία οι αεραγωγοί θεωρήθηκαν προσεγγιστικά κυλινδρικής διατομής και η ροή αέρα δια μέσω αυτών μονοδιάστατη. Το μοντέλο που θα αναλυθεί παρακάτω είναι του Weibel, γνωστό ως Weibel A.

#### 3.1.1 Μοντέλο Weibel A

Το πρώτο συμμετρικό πνευμονικό μοντέλο το κατασκεύασε ο Weibel, γνωστό ως Weibel A model. Σε αυτό το μοντέλο το αναπνευστικό σύστημα αποτελείται από ένα δίκτυο κυλινδρικών αεραγωγών, όπου κάθε αεραγωγός διχοτομείται σε άλλους δυο
αεραγωγούς πανομοιότυπους μεταξύ τους. Κάθε διαδρομή ξεκινάει από την τραχεία (trachea) στην 0<sup>η</sup> γενιά και καταλήγει στους κυψελιδικούς σάκους (alveolar sacs) στην 23<sup>η</sup> γενιά, περιέχοντας κυψελίδες στις 17-23 γενιές.



Σχήμα 3.1: Πρώτο μοντέλο Weibel A

Στη συνέχεια, ο Weibel (Weibel, Sapoval & Filoche, 2005), με τροποποιήσεις στα δεδομένα του Haefeli-Bleuerv (1988), επανασχεδίασε και επαναδιατύπωσε το μοντέλο του, όπου κυψελίδες εμφανίζονται στις 15-23 γενιές.



Σχήμα 3.2: Τροποποιημένο μοντέλο Weibel A

Όσον αναφορά το τροποποιημένο μοντέλο, οι γενιές 0-14 δεν περιέχουν κυψελίδες και αποτελούν την τραχειοβρογχική περιοχή (trachea-bronchial region), των οποίων οι αεραγωγοί ονομάζονται «conducting airways». Οι γενιές 15-23 περιέχουν κυψελίδες και αποτελούν την κυψελιδική περιοχή (alveolar region), των οποίων οι αεραγωγοί ονομάζονται «acinar airways».

Μια ακόμα σημαντική παράμετρος είναι το κλάσμα επικάλυψης f των αεραγωγών από κυψελίδες. Στον πίνακα 3.1 φαίνονται οι τιμές του f για κάθε γενιά αεραγωγών. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, καθώς αυξάνεται ο αριθμός της γενιάς οι αεραγωγοί καλύπτονται με περισσότερες κυψελίδες.

Gen, Z	D(mm)	<i>l</i> (mm)	f
0	18	120	0
1	12,2	47.6	0
2	9,14	20,9	0
3	6,17	8,37	0
4	4,96	13,99	0
5	3,86	11,79	0
6	3,08	9,91	0
7	2,53	8,37	0
8	2,05	7.05	0
9	1,70	5,95	0
10	1,43	5,07	0
11	1,16	3,92	0
12	0,94	3.03	0
13	0.76	2,34	0
14	0.62	1.81	0
15	0,50	1.40	0.2
16	0,50	1,33	0.4
17	0,49	1.12	0.7
18	0.40	0,93	1
19	0,38	0.83	1
20	0,36	0.70	1
21	0.34	0.70	1
22	0.31	0.70	1
23	0.29	0.70	1

Πίνακας 3.1 Δεδομένα διαστάσεων για πνεύμονα μέσου ενήλικα όπου είναι εκφρασμένα σε κατάσταση TLC

## 3.1.2 Μοντέλο Τρομπέτας (Trumpet Model)

Η δομή και η γεωμετρία του πνεύμονα είναι ιδιαίτερα πολύπλοκη και για αυτό το λόγο αναλύουμε το σύστημα του μοντέλου Weibel A ως μονοδιάστατο με κύρια παράμετρο του συστήματος το x, όπου x το βάθος του πνεύμονα.

Έχουμε ότι το βάθος x ξεκινάει από την τραχεία στην 0<sup>η</sup> γενιά και καταλήγει στους κυψελιδικούς σάκους στην 23<sup>η</sup> γενιά. Οπότε, κάθε σημείο του «δένδρου» με τους βρόγχους μπορεί να χαρακτηριστεί από την απόσταση του βάθους x.

Στο μοντέλο της τρομπέτας θεωρούμε ότι αντί για την γενιά z  $(0 \le z \le 23)$  να έχουμε  $2^z$  αεραγωγούς με διάμετρο  $d_z$  και εμβαδόν διατομής  $\frac{\pi d_z^2}{4}$ , έχουμε έναν αεραγωγό με την συνολική διατομή:

$$A_z = 2^z \, \frac{\pi \, d_z^{-2}}{4} \quad (3.1)$$



Σχήμα 3.3: Μοντέλο Τρομπέτας

# 3.1.3 Γεωμετρικά μεγέθη μοντέλου Weibel A

Τα γεωμετρικά μεγέθη που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο του Weibel A είναι:

 $l_z$ : το μήκος του αεραγωγού $d_z$ : η διάμετρος του αεραγωγού $V_{T,z}$ : ο συνολικός όγκος αέρας που περιέχεται στην γενιά z

Ο συνολικός όγκος  $V_{T,z}$  αφορά το άθροισμα του όγκου αέρα στις κυψελίδες  $V_{a,z}$  και του όγκου αέρα  $V_{d,z}$  στους αεραγωγούς της γενιάς z, δηλαδή:

$$V_{T,z} = V_{a,z} + V_{d,z}$$
 (3.2)

$$V_{d,z} = 2^{z} \left(\frac{\pi d_{z}^{2}}{4}\right) l_{z} (3.3)$$

Για τις γενιές 0-14, όπου δεν υπάρχουν κυψελίδες ο συνολικός όγκος  $V_{T,z}$  είναι ο όγκος των αεραγωγών της γενιάς z, δηλαδή:

$$V_{T,z} = V_{d,z}$$
 (3.4)

Παρακάτω δίνεται ο πίνακας 3.2 με τις τιμές των μεγεθών κατά τον Finlay και τον Weibel. Για τις τιμές του Finlay και Weibel θεωρούμε ότι συνολικός όγκος αέρα πριν την εισπνοή FRC= 31 και όγκος της κυψελίδας 10<sup>-5</sup> ml. Ακόμα, για τον Finlay οι κυψελίδες εμφανίζονται στις γενιές 15-23, ενώ κατά τον Weibel στις γενιές 17-23.

Πίνακας 3.2: Γεωμετρικά μεγέθη για Weibel και Finlay (Finlay, 2001)

Generation	Finlay et al. model length (cm)	Scaled Weibel A length (cm)	Finlay <i>et al.</i> model diameter (cm)	Scaled Weibel A diameter (cm)	Finlay et al. model cumulative volume (cc)	Scaled Weibel A cumulative volume (cc)
0 (trachea)	12.456	10.26	1.81	1.539	32.05	19.07
1	3.614	4.07	1.414	1.043	43.401	25.64
2	2.862	1.624	1.115	0.71	54.572	28.64
3	2.281	0.65	0.885	0.479	65.786	29.5
4	1.78	1.086	0.706	0.385	76.918	31.7
5	1.126	0.915	0.565	0.299	85.948	33.76
6	0.897	0.769	0.454	0.239	95.237	35.95
7	0.828	0.65	0.364	0.197	106.236	38.39
8	0.745	0.547	0.286	0.159	118.458	41.14
9	0.653	0.462	0.218	0.132	130.922	44.39
10	0.555	0.393	0.162	0.111	142.711	48.26
11	0.454	0.333	0.121	0.093	153.381	53.01
12	0.357	0.282	0.092	0.081	163.119	59.14
13	0.277	0.231	0.073	0.07	172.644	66.26
14	0.219	0.197	0.061	0.063	183.13	77.14
15	0.134	0.171	0.049	0.056	204.967	90.7
16	0.109	0.141	0.048	0.051	239.898	190.26
17	0.091	0.121	0.039	0.046	284.101	139.32
18	0.081	0.1	0.037	0.043	357.893	190.61
19	0.068	0.085	0.035	0.04	474.046	288.17
20	0.068	0.071	0.033	0.038	689.872	512.95
21	0.068	0.06	0.03	0.037	1067.707	925.25
22	0.065	0.05	0.028	0.035	1742.742	1694.17
23	0.073	0.043	0.024	0.035	3000	3000

## 3.2 Εναπόθεση σωματιδίων

Κάθε μέρα δισεκατομμύρια εισπνεόμενα σωματίδια εισέρχονται στον ανθρώπινο οργανισμό μέσω της ατμόσφαιρας. Πολλά από αυτά τα σωματίδια επικάθονται στο αναπνευστικό σύστημα ανάλογα με το μέγεθος, το σχήμα, την πυκνότητα, το φορτίο τους, καθώς και με τις επιφανειακές ιδιότητες τους και την συχνότητα αναπνοής του κάθε ανθρώπου. Μελετώντας την τοξικότητα των σωματιδίων στον οργανισμό, έχει βρεθεί ότι σωματίδια μεγέθους μικρότερου των 10 μm επηρεάζουν την αναπνευστική λειτουργία, ιδίως σε ανθρώπους με ευαισθησία στους πνεύμονες.

Όσο αναφορά τους ασθενείς που υπόκεινται σε κάποια ιατρική αγωγή για τους πνεύμονες με φαρμακευτικά σκευάσματα, το πλήθος των μη τοξικών σωματιδίων που περιέχονται σε αυτά λειτουργούν θεραπευτικά ως προς το πρόβλημα που δυσχεραίνει την ομαλή λειτουργία του αναπνευστικού συστήματος. Σε αντίθεση με τα ατμοσφαιρικά σωματίδια, το μέγεθος των σωματιδίων ιατρικών φαρμάκων κατανέμεται γύρω από συγκεκριμένες τιμές. Ακόμη, το σχήμα αυτών είναι γνωστό και η εναπόθεση τους στο αναπνευστικό σύστημα μπορεί να προβλεφθεί και να υπολογιστεί με μεγάλη ακρίβεια.

Τα σωματίδια εισέρχονται στο σύστημα μαζί με τον αέρα. Όμως, η πορεία που θα ακολουθήσουν μέσα σε αυτό διαφέρει από τη ροή των γραμμών του αέρα. Αυτό συμβαίνει διότι στα σωματίδια ασκούνται μηχανικές δυνάμεις, οι οποίες είναι βαρυτικές, αδρανειακές και προωθητικές από συγκρούσεις με τα υπόλοιπα μόρια του αερίου. Επομένως, οι τρείς κύριοι μηχανισμοί μεταφοράς και εναπόθεσης των σωματιδίων στον πνεύμονα είναι η βαρυτική καθίζηση (gravitational settling or sedimentation), η αδρανειακή πρόσκρουση (inertial impaction) και η διάχυση Brown (Brownian diffusion).

## Ρόλος μεγέθους σωματιδίου

Το μέγεθος του σωματιδίων παίζει σημαντικό ρόλο όσον αναφορά τον μηχανισμό μεταφοράς και εναπόθεσης του στον πνεύμονα. Για τα διάφορα μεγέθη των σωματιδίων έχουμε την εξής διακριτοποίση:

- Σωματίδια διαμέτρου μικρότερης των 0,1 μm εναποτίθενται αποκλειστικά με διάχυση Brown.
- Σωματίδια διαμέτρου 0,1-1 μm εναποτίθενται με βαρυτική καθίζηση και διάχυση Brown.

Σωματίδια διαμέτρου μεγαλύτερης των 1 μm εναποτίθενται βαρυτική καθίζηση και αδρανειακή πρόσκρουση.



Σχήμα 3.4: Εναπόθεση σωματιδίων ανάλογα με την διάμετρο τους (Heyder 2004)

## 3.2.1 Πιθανότητες εναπόθεσης σωματιδίων

Ένα μέγεθος που μας ενδιαφέρει να καθορίσουμε είναι η συνολική εναπόθεση των σωματιδίων, η οποία είναι η μέση πιθανότητα να επικαθίσει ένα εισπνεόμενο σωματίδιο στον πνεύμονα. Η εναπόθεση αυτή μπορεί είτε να μην συμβεί και το σωματίδιο να απομακρυνθεί κατά την εκπνοή είτε να συμβεί με έναν από τους μηχανισμούς εναπόθεσης (βαρυτική καθίζηση, αδρανειακή πρόσκρουση, διάχυση Brown). Οπότε θα προκύψουν τα εξής:

$$P_{no\ deposition} = P((no\ diffusion) \cap (no\ sedimentation)) \cap (no\ impaction))$$

$$P_{no \ deposition} = 1 - P_{T,z} = (1 - P_{D,z}) (1 - P_{G,z}) (1 - P_{I,z})$$
(3.5)

$$P_{T,z} = P_{I,z} + P_{G,z} + P_{D,z} - P_{I,z}P_{G,z} - P_{I,z}P_{D,z} - P_{G,z}P_{D,z} + P_{I,z}P_{G,z}P_{D,z}$$
(3.6)

Όπου:

*P<sub>no deposition</sub>*: Η πιθανότητα να μην υπάρχει εναπόθεση σωματιδίων με τους τρεις μηχανισμούς που έχουν αναφερθεί.

*P<sub>T,z</sub>*: Η συνολική πιθανότητα εναπόθεσης σωματιδίων γενιάς z και με τους τρεις μηχανισμούς που έχουν αναφερθεί.

 $P_{I,z}$ : Η πιθανότητα εναπόθεσης σωματιδίων γενιάς z με αδρανειακή πρόσκρουση (inertial impaction).

 $P_{G,z}$ : Η πιθανότητα εναπόθεσης σωματιδίων γενιάς z με βαρυτική καθίζηση (gravitational settling or sedimentation).

 $P_{D,z}$ : Η πιθανότητα εναπόθεσης σωματιδίων γενιάς z με διάχυση Brown (Brownian diffusion).

Υπάρχουν και άλλες προσεγγίσεις για τον υπολογισμό της συνολικής πιθανότητας εναπόθεσης. Κάποιοι από αυτούς παρουσιάζονται παρακάτω.

$$P_{T,z} = (P_{I,z} + P_{G,z} + P_{D,z})^{1/p}$$
(3.7)

Όσον αναφορά τις τιμές που μπορεί να πάρει η σταθερά p, υπάρχουν αρκετές προτάσεις από επιστήμονες. Οι Asgharian και Anjilvel το 1994 πρότειναν τις τιμές p=3 για ευθεία αεραγωγούς και p =1,4 για αεραγωγούς με διακλαδώσεις. Την ίδια χρονιά (1994) προτάθηκε από την ICRP (International Commission on Radiological Protection) η τιμή p=2.

Κατά Heyder et al. (1985), όταν μόνο παρίσταται μόνο διάχυση και βαρυτική καθίζηση προτείνεται η έκφραση:

$$P_{T,z} = P_{D,z} + P_{G,z} - \frac{P_{G,z} P_{D,z}}{P_{G,z} + P_{D,z}}$$
(3.8)

Κατά Balásházy et al. (1990), όταν η διάχυση είναι αμελητέα προτείνεται η έκφραση:

$$P_{T,z} = P_{I,z} + P_{G,z} - P_{I,z}P_{G,z} \quad (3.9)$$

#### 3.2.2 Συμπεριφορά σωματιδίου σε ρευστό

Πριν την ανάλυση των μηχανισμών εναπόθεσης θα εξηγηθούν κάποιοι παράμετροι που επηρεάζουν την συμπεριφορά των σωματιδίων μέσα σε ρευστό, το οποίο ρευστό στην προκειμένη περίπτωση είναι ο αέρας της ατμόσφαιρας και τα αέρια του πνεύμονα. Θεωρούμε ένα σωματίδιο σε κίνηση σχετική ως προς τον αέρα. Είτε το σωματίδιο ή ο αέρας ή και τα δυο μπορεί να είναι κινούμενα σχετικά ως προς ένα απόλυτο σύστημα αναφοράς. Ο αέρας ασκεί μια οπισθέλκουσα δύναμη στο σωματίδιο, η οποία δρα για να αντιτίθεται στην σχετική ταχύτητα του σωματιδίου. Η οπισθέλκουσα δύναμη μπορεί να παρασταθεί από την έκφραση:

$$F_D = \frac{C_D A_p \rho_f v_r^2}{2} \qquad (3.10)$$

Όπου:

$$F_D$$
: η οπισθέλκουσα δύναμη σε N (SI)  
 $C_D$ : ο συντελεστής οπισθέλκουσας  
 $A_p$ : η προβαλλόμενη επιφάνεια του σωματιδίου σε m<sup>2</sup> (SI)  
 $\rho_f$ : πυκνότητα ρευστού, αέρα εδώ, σε kg/m<sup>3</sup>  
 $v_r$ : σχετική ταχύτητα σε m/s (SI)

Συνήθως, ο συντελεστής οπισθέλκουσας C<sub>D</sub> είναι υποχρεωτικό να προσδιοριστεί πειραματικά γιατί αποτελεί ισχυρή συνάρτηση του σχήματος του σωματιδίου και του τύπου ροής. Ο τύπος της ροής χαρακτηρίζεται από τον αριθμό Reynolds. Για ένα σωματίδιο ο αριθμός Reynolds δίνεται από την έκφραση:

$$\operatorname{Re} = \frac{d_p v_r \rho_f}{\mu} \qquad (3.11)$$

Όπου:

 $d_p$ : η διάμετρος του σωματιδίου σε m (SI) μ: το δυναμικό ιξώδες του ρευστού, αέρας εδώ, σε kg/m·s Στην παρούσα διπλωματική εργασία οι παραπάνω εξισώσεις εφαρμόζονται για σωματίδια σφαιρικού και άκαμπτου σχήματος και με αριθμούς Re<1, δηλαδή σε καθεστώς ροής που είναι γνωστό ως περιοχή Stokes. Επομένως, για άκαμπτες σφαίρες και για αριθμούς Reynolds μικρότερους της μονάδας προκύπτει ο νόμος του Stokes:

$$F_D = 3\pi\mu d_p v_r \qquad (3.12)$$
$$\mu\epsilon \quad C_D = \frac{24}{Re} \qquad (3.13)$$

Παρ' όλα αυτά, υπάρχει ένα κάτω όριο για το μέγεθος του σωματιδίου στον νόμο του Stokes. Όταν το σωματίδιο είναι μεγάλο σχετικά με την μέση ελεύθερη διαδρομή λ του αέρα, το ρευστό μπορεί να μοντελοποιηθεί ως συνεχές. Ωστόσο, όταν η διάμετρος του σωματιδίου  $d_p$  είναι του ίδιου μεγέθους όπως το λ, το σωματίδιο δεν «αισθάνεται» πια το ρευστό ως συνεχές, αλλά ως διακριτά μόρια. Το σωματίδιο είναι ικανό να «γλιστρά» ανάμεσα στα μόρια του αέρα και αυτή η ολίσθηση μειώνει την ενεργή οπισθέλκουσα πάνω στα σωματίδια που προβλέπει ο νόμος του Stokes. Ο παράγοντας διόρθωσης του Cunningham διορθώνει το συντελεστή οπισθέλκουσας του Stokes για αυτή την επίδραση. Ο παράγοντας διόρθωσης Cunningham δίνεται από την έκφραση (Wark & Warner 1981):

$$C = 1 + 2 \frac{\lambda}{d_p} \left[ 1,257 + 0,4 \exp(-0,55 d_p/\lambda) \right] \quad (3.14)$$

Όπου:

λ: η μέση ελεύθερη διαδρομή σε m (SI)



Flagan and Seinfeld, 1988

Σχήμα 3.5: (a) Συνεχές μέσο (b) διάμετρος dp πολύ μικρή (c) λ συγκρίσιμο με dp

Η μέση ελεύθερη διαδρομή μπορεί να προκύψει από την κινητική θεωρία των αερίων και εκφράζεται από την σχέση:

$$\lambda = \frac{\mu}{0,499P\sqrt{8\,MW/\pi RT}} \qquad (3.15)$$

Η μεταβολή του παράγοντα διόρθωσης Cunningham με το μέγεθος του σωματιδίου δίνεται στον πίνακα 3.3. Για σωματίδια μικρότερα του 1 μm, ο παράγοντας διόρθωσης ολίσθησης είναι πάντα σημαντικός, αλλά προσεγγίζει γρήγορα την τιμή 1 καθώς το μέγεθος του σωματιδίου αυξάνεται πάνω από τα 5 μm. Ο διορθωμένος συντελεστής οπισθέλκουσας C'<sub>D</sub> είναι ο συντελεστής οπισθέλκουσας του Stokes διαιρεμένος με τον παράγοντα διόρθωσης του Cunningham. Στην προκειμένη περίπτωση που ο αριθμός Reynolds είναι μικρότερης της μονάδας θα ισχύει:

$$C'_{D} = \frac{C_{D}}{C} = \frac{24}{CRe}$$
 (3.16)

Πίνακας 3.3: Συντελεστές Cunningham

and the second se	
<i>d<sub>p</sub></i> , μm	С
0.01	22.5
0.05	5.02
0.10	2.89
0.50	1.334
1.0	1.166
2.0	1.083
5.0	1.033
10.0	1.017

# 3.2.3 Μηχανισμοί Εναπόθεσης

## Διάχυση Brown (Brownian diffusion)

Ο μηχανισμός εναπόθεσης με μοριακή διάχυση ή αλλιώς διάχυση Brown αφορά κυρίως σωματίδια μικρού μεγέθους. Συγκεκριμένα, αφορά σωματίδια με διάμετρο μικρότερη από 1μm. Για να περιγράψουμε αυτόν τον μηχανισμό ας φανταστούμε ένα μικρό σωματίδιο να κινείται μέσα σε αεραγωγό. Καθώς το σωματίδιο κινείται με τη ροή συγκρούεται με τα μόρια του αέρα τα οποία έχουν τυχαία κίνηση. Οι συγκρούσεις αυτές υποβάλουν το σωματίδιο σε μία επίσης τυχαία κίνηση. Την κίνηση αυτή την ονομάζουμε κίνηση Brown και με τα εργαλεία της κλασσικής φυσικής δεν μπορούμε να την περιγράψουμε.

Μιλάμε πλέον για πιθανότητα το σωματίδιο να βρίσκεται σε μια συγκεκριμένη θέση. Εάν το σωματίδιο μέσω αυτής της τυχαίας κίνησης έρθει σε επαφή με το τοίχωμα του αγωγού τότε εναποτίθεται. Ο Einstein το 1905 υπολόγισε την μέση τετραγωνική μετατόπιση σωματιδίου x<sub>d</sub> σε χρόνο t, ο οποίος χρόνος είναι πολύ μεγαλύτερος από το χρόνο που διαρκούν οι συγκρούσεις με τα μόρια. Υπολόγισε λοιπόν αυτή ως εξής:

$$x_d = \sqrt{2tD_{Br}} \tag{3.17}$$

$$\mu \varepsilon \qquad D_{Br} = \frac{k T C_c}{3 \pi \mu d_p} \qquad (3.18)$$

Όπου:

 $k = 1.38 \cdot 10^{-23} J \cdot K^{-1}$ : η σταθερά του Boltzmann T: η θερμοκρασία σε Kelvin Cc: ο συντελεστής διόρθωσης Cunningham  $d_p$ : η διάμετρος του σωματιδίου  $\mu$ : το δυναμικό ιξώδες του περιβάλλοντος ρευστού



Σχήμα 3.6: Διάχυση Brown

Η πιθανότητα εναπόθεσης λόγω διάχυσης Brown δίνεται από τη σχέση (Ingham, 1975):

$$P_{D,z} = 1 - 0.819e^{-14.63K} - 0.0967^{-89.22K} - 0.0325e^{-228K} - 0.0509^{-125.9K^{2/3}}$$
(3.19)

Το Κ είναι αδιάστατος αριθμός και δίνεται ως:

$$K = \frac{D_{Br}l_z}{u_z d_z^2} = \frac{kTC_c}{3\pi\mu d_p} \frac{l_z}{u_z d_z^2} \quad (3.20)$$

Όπου το  $l_z$  είναι το μήκος του αεραγωγού ,το  $d_z$  η διάμετρος του αεραγωγού και  $u_z$  η μέση ταχύτητα στον αεραγωγό.

Τέλος είναι σημαντικό να αναφερθεί εδώ η προσέγγιση των Choi και Kim όσον αφορά την ενεργό διαχυτότητα. Συγκεκριμένα πρότειναν για τον υπολογισμό του συντελεστή της ενεργού διαχυτότητας  $D_{eff}$  την εξής σχέση:

$$D_{eff} = D_{Br} + D_{mix} \qquad (3.21)$$

Ο πρώτος όρος  $D_{Br}$  αφορά τη συνεισφορά της διάχυση Brown και ο δεύτερος τη συνεισφορά της συναγωγικής ανάμειξης στο συντελεστή διαχυτότητας. Ο δεύτερος όρος ισούται με:

$$D_{mix} = 0,167u_z l_z \qquad (3.22)$$

Η  $u_z$  είναι η μέση ταχύτητα και υπολογίζεται ως η ογκομετρική παροχή προς το εμβαδόν της επιφάνεια που είναι κάθετη στη ροή. Το μήκος  $l_z$  εκτιμάτε αντικαθιστώντας τη διάμετρο  $d_z$  στην προσεγγιστική σχέση  $l_z/d_z \approx 3$ .

#### Βαρυτική καθίζηση (gravitational settling or sedimentation)

Πρόκειται για έναν μηχανισμό επικάθισης ο οποίος λειτουργεί με τη δύναμη της βαρύτητας που ασκείται σε ένα σωματίδιο και το εξαναγκάζει να καθιζάνει μέχρι αυτό να εναποτεθεί. Αν θεωρήσουμε ότι αφήνουμε ένα σωματίδιο μέσα σε ακίνητο αέρα ,όπου του ασκείται βαρύτητα με συντελεστή επιτάχυνσης g ,με αρχική ταχύτητα στην κατεύθυνση της βαρύτητας ίση με μηδέν τότε η εξίσωση κίνησης του σωματιδίου είναι η παρακάτω:

$$\frac{dv_r}{dt} + \frac{v_r}{\tau'} = \left(\frac{\rho_g - \rho_F}{\rho_p}\right)g \qquad (3.23)$$

Ο όρος  $\left(\frac{\rho_g - \rho_F}{\rho_p}\right)$ διορθώνει για την άνωση σωματιδίου στο ρευστό. Λύνοντας την (3.23) λαμβάνουμε:

$$v_r = v_t \left[ 1 - ex \, p \left( -\frac{t}{\tau'} \right) \right] \qquad (3.24)$$

Όπου το  $v_t$ είναι η οριακή ταχύτητα καθίζησης και γράφουμε ότι:

$$v_t = \tau' g = \frac{C_c \rho_p d_p^2}{18\mu} g \qquad (3.25)$$



Σχήμα 3.7 : Βαρυτική καθίζηση

Η πιθανότητα να συλληφθεί σωματίδιο στους αεραγωγούς των πνευμόνων με βαρυτική καθίζηση είναι:

Για τις πρώτες πέντε γενιές  $(1 \le z \le 5)$ :

$$P_{G,z} = 1 - exp\left(-\frac{16G}{3\pi}\right) \tag{3.26}$$

$$\mu\varepsilon \quad G = \frac{3}{4} \frac{v_t \ l_z}{u_z \ d_z} \cos\theta \quad (3.27)$$

Το θ είναι ίσο με 38,24° και περιγράφει τη μέση επίδραση μεγάλου αριθμού τυχαία διακλαδωμένων αεραγωγών.

Για τις υπόλοιπες γενιές (z ≥6) η πιθανότητα γίνεται:

$$P_{G,z} = \frac{2}{\pi} \left[ \left( 2G - G^{1/3} \right) \sqrt{1 - G^{1/3}} + \sin^{-1} \left( G^{1/3} \right) \right] \quad (3.28)$$

Παρατίθεται το σχήμα 3.8 που δείχνει την επικάθιση σωματιδίων στα μέρη της αναπνευστικής οδού ανάλογα με το μέγεθος σωματιδίου.



Σχήμα 3.8: Εναπόθεση σωματιδίων σε περιοχές του πνεύμονα

#### Αδρανειακή πρόσκρουση (inertial impaction)

Όταν οι ροικές γραμμές ενός εν κινήσει ρευστού εκτραπούν λόγω κάποιου εμποδίου, στην προκειμένη περίπτωση αυτό μπορεί να είναι μια διακλάδωση των αγωγών, τότε τα σωματίδια που μεταφέρει το ρευστό λόγω αδρανείας δεν θα ακολουθήσουν τις ροικές γραμμές. Έτσι τα σωματίδια αυτά προσκρούουν στα τοιχώματα του αγωγού και εναποτίθενται σε αυτά. Όταν οι ταχύτητες ροής είναι μεγάλες το φαινόμενο οξύνεται. Ο μηχανισμός αυτός εναπόθεσης λοιπόν λειτουργεί έντονα στην άνω αναπνευστική οδό εκεί που οι ταχύτητες ροής είναι υψηλότερες.



Σχήμα 3.9 Αδρανειακή πρόσκρουση

Η απόδοση της αδρανειακής πρόσκρουσης είναι ο ίδιος ο αριθμός Stokes (Stk). Η παράμετρος Stk για το συγκεκριμένο πρόβλημα που μελετάται καθορίζεται από δύο χαρακτηριστικούς χρόνους ο χρόνος χαλάρωσης (relaxation time) και ο άλλος είναι ο χρόνος ροής ή εμποδίου (collision time). Έτσι η παράμετρος *Stk* προκύπτει ως εξής:

Stk = 
$$\frac{relaxation time}{collision time} = \frac{\frac{\rho_p d_p^2 C_c}{18\mu}}{\frac{d_z}{u_z}}$$
 (3.29)

$$Stk = \frac{C_c \rho_p d_p^2 u_z}{18\mu d_z} \tag{3.30}$$

Οι παράγοντες που αποτελούν την παράμετρο Stk έχουν ήδη αναφερθεί και κατονομασθεί προηγουμένως. Τα σωματίδια για τα οποία Stk « 1 δεν θα εκτραπούν από τις ροικές γραμμές και έτσι δεν θα προσκρούσουν σε τοίχωμα. Υπάρχουν διάφορες εμπειρικές σχέσεις και διαγράμματα στη βιβλιογραφία για τον υπολογισμό της πιθανότητας εναπόθεσης με αδρανειακή πρόσκρουση εδώ θα αναφέρουμε την παρακάτω:

$$P_{I,z} = 1.53473Stk$$
 (3.31)

## 3.3 Μεταβολή ροής αέρα και γεωμετρίας πνεύμονα

Το αναπνευστικό σύστημα, όπως έχει ήδη αναφερθεί, μοντελοποιείται ως συμμετρικά διχαλωτό και διακλαδωμένο δίκτυο και αποτελείται από την τραχεία στον οισοφάγο και στην συνέχεια από Z=23 γενιές αεραγωγών. Οι 23 γενιές αεραγωγών διαφοροποιούνται διαμετρικά κατά την διάρκεια της αναπνοής και παρουσιάζουν ελαστικότητα, δηλαδή διαστέλλονται και συστέλλονται κατά την εισπνοή και εκπνοή αντίστοιχα. Στην παρούσα διπλωματική εργασία δεν θα ληφθεί υπόψιν η συστολοδιαστολή των αεραγωγών. Παρ 'όλα αυτά, θα μελετηθεί εν συντομία το μοντέλο ελαστικότητας των Lambert, Wilson, Hyatt και Rodarte.

Θεωρούμε ότι η ροή αέρα στον πνεύμονα είναι ασυμπίεστη. Ακόμη, οι αεραγωγοί γενιάς z, όπου  $0 \le z \le 23$ , είναι κυλινδρικής μορφής διαμέτρου dz και μήκους lz, παράμετροι που φθίνουν συναρτησιακά, καθώς ο αριθμός z της γενιάς αυξάνεται και εισχωρούμε βαθύτερα στον πνεύμονα. Όσον αναφορά τις κυψελίδες, αυτές εμφανίζονται στην παράπλευρη επιφάνεια των αεραγωγών z=15-23 και το κλάσμα επικάλυψης του τοιχώματος του αεραγωγού από κυψελίδες, fi, αυξάνεται καθώς αυξάνεται και ο αριθμός της γενιάς. Υποθέτουμε ότι όλες οι κυψελίδες έχουν το ίδιο μέγεθος και η διαστολή-συστολή τους επιτυγχάνεται με το ίδιο ρυθμό.

Πιο συγκεκριμένα, η διάμετρος του αεραγωγού εκφράζεται ως συνάρτηση της ενδοθωρακικής πίεσης ΔP (intramural pressure) και παρουσιάζονται οι δύο παρακάτω εξισώσεις:

$$\frac{d_z^2}{d_{z,max}^2} = \alpha_0 \left( 1 - \frac{\Delta P}{P_1} \right)^{-n_1}, \qquad \Delta P \le 0$$
(3.32a)

$$\frac{d_z^2}{d_{z,max}^2} = 1 - (1 - \alpha_0) \left(1 - \frac{\Delta P}{P_2}\right)^{-n_2}, \qquad \Delta P > 0 \ (3.32 \text{ b})$$

όπου:

$$P_{1} = \alpha_{0} n_{1} / \alpha'_{0}$$
(3.33a)  
$$P_{2} = -n_{2} (1 - \alpha_{0}) / \alpha'_{0}$$
(3.33b)

Η  $d_{z,max}$  είναι η μέγιστη διάμετρος του αεραγωγού της γενιάς z και οι συντελεστές ελαστικότητας  $n_1, n_2, \alpha_0, \alpha'_0$  δίνονται από τους Lambert et al.

Το 1998 ο Polak εισήγαγε την εξίσωση που συνδέει την ενδοθωρακική πίεση  $\Delta P$  συναρτήσει του χρόνου t και του στιγμιαίου όγκο του πνεύμονα όγκο  $V_L(t)$ , η οποία είναι η εξής:

$$\Delta P(t) = \frac{V_{L,max} - V_{L,min}}{C_{L0}} \ln \left( \frac{V_{L,max} - V_{L,min}}{V_{L,max} - V_{L}(t)} \right)$$
(3.34)

Όπου  $C_{L0}$  είναι ο συντελεστής ελαστικότητας του πνεύμονα, δηλαδή η ικανότητα του να διαστέλλεται και αυξάνει τον όγκο του για πίεση  $\Delta P=0$ .

Ta  $V_{L,max} = \text{TLC} + 0.1 \text{ L}$  kai  $V_{L,min} = \text{RV} - 0.1 \text{L}$ 

Γνωρίζοντας τις διαμέτρους των αεραγωγών κάθε γενιάς και τον στιγμιαίο όγκο  $V_L(t) = FRC$  υπολογίζουμε την πίεση ΔΡ. Γνωρίζοντας την πίεση μπορεί να υπολογιστεί και η μέγιστη διάμετρος των αεραγωγών.

z	$\alpha_0$	$lpha_0'$	$n_1$	$n_2$	Am, cm <sup>2</sup>	L, cm
0	0.882	0.000011	0.50	10.00	2.37	12.00
1	0.882	0.000011	0.50	10.00	2.37	4.76
2	0.686	0.000051	0.60	10.00	2.80	1.90
3	0.546	0.000080	0.60	10.00	3.50	0.76
4	0.450	0.000100	0.70	10.00	4.50	1.27
5	0.370	0.000125	0.80	10.00	5.30	1.07
6	0.310	0.000142	0.90	10.00	6.50	0.90
7	0.255	0.000159	1.00	10.00	8.00	0.76
8	0.213	0.000174	1.00	10.00	10.20	0.64
9	0.184	0.000184	1.00	10.00	12.70	0.54
10	0.153	0.000194	1.00	10.00	15.94	0.47
11	0.125	0.000206	1.00	9.00	20.70	0.39
12	0.100	0.000218	1.00	8.00	28.80	0.33
13	0.075	0.000226	1.00	8.00	44.50	0.27
14	0.057	0.000233	1.00	8.00	69.40	0.23
15	0.045	0.000239	1.00	7.00	113.00	0.20
16	0.039	0.000243	1.00	7.00	180.00	0.17

Πίνακας 3.4 : Πίνακας σταθερών Lambert

# 3.4 Ογκομετρική παροχή αεραγωγών και κυψελίδων

Κατά την εισπνοή τόσο οι αεραγωγοί όσο και οι κυψελίδες διαστέλλονται. Όπως έχει ήδη αναφερθεί ο πνεύμονας αποτελείται από 23 γενιές αεραγωγών κυλινδρικής διατομής. Η επιφάνεια αυτής της κυλινδρικής διατομής υπολογίζεται ως εξής (Weibel 1995) :

$$A_z = 2^z \left(\frac{\pi d_z^2}{4}\right) \quad (3.1)$$

Όπου:

z: ο αριθμός της γενιάς, με  $0 \le z \le 23$  $d_z$ : η διάμετρος του αεραγωγού z

Για αριθμό γενιάς  $z \ge 15$ , οι αεραγωγοί στην περιφέρεια τους επικαλύπτονται από κυψελίδες. Μέρος του εισερχόμενου όγκου αέρα στους αεραγωγούς μεταφέρεται και στις κυψελίδες. Θεωρούμε ότι η ροή αέρα στους αεραγωγούς είναι αξονική κατά μήκος του οριζόντιου άξονα x και η ροή αέρα στις κυψελίδες έχει ακτινική διεύθυνση.



Σχήμα 3.10: Ογκομετρικές παροχές

Για το ισοζύγιο στο σχήμα 3.10 ισχύει ότι:

$$Q_{d,z} = Q_{a,z} + Q_{d,z+1} \quad (3.35)$$

Το  $Q_{d,z}$  μπορεί να υπολογιστεί σε κάθε γενιά μέσω της διαστολής της διαμέτρου ως εξής:

$$Q_{d,z}(t) = \frac{d}{dt} \left( V_{d,z} \right) = \frac{d}{dt} \left( 2^z l_z \frac{\pi d_z^2}{4} \right) \quad (3.36)$$

Και το  $Q_{a,z}$  αντίστοιχα ως:

$$Q_{a,z} = \frac{d}{dt} (V_{a,z}) = \frac{d}{dt} (N_{a,z} V_{1a})$$

$$Q_{a,z} = N_{a,z} \frac{dV_{1a}}{dt} \qquad (3.37)$$

Όπου:

$$V_{a,z} = N_{a,z}V_{1a}$$
 (3.38)

# $N_{a,z}$ : είναι ο αριθμός κυψελίδων της γενιάς z

 $V_{1a}:$ είναι ο όγκος μιας κυψελίδας (υποθέτουμε πως όλες οι κυψελίδες έχουν τον ίδιο όγκο)

Έστω ότι ο χρόνος εισπνοής είναι  $T_{inh}$  (inhalation time ) και εισάγεται συγκεκριμένη ποσότητα αέρα όγκου TV (Tidal Volume ).

Τότε η συνολική ογκομετρική παροχή στην είσοδο της τραχείας θα είναι :

$$Q_0 = Q_{inh} = \frac{TV}{T_{inh}} \quad (3.39)$$

Άν από την αρχική παροχή  $Q_0$  που εισέρχεται στο στόμα αφαιρεθεί το άθροισμα των παροχών  $Q_{d,z}$  στους αεραγωγούς τότε μπορούμε να υπολογίσουμε την συνολική παροχή που εισέρχεται στις κυψελίδες. Συγκεκριμένα για την γένια z έχουμε ότι:

$$Q_{\alpha,z}(t) = \left(\frac{V_{\alpha,z}}{\sum_{j=0}^{23} V_{\alpha,j}}\right) \left(Q_0 - \sum_{j=0}^{N} Q_{d,j}\right) \quad (3.40)$$

Ο όρος  $\left(\frac{V_{\alpha 0,z}}{\sum_{j=0}^{N} V_{\alpha 0,j}}\right)$  μας δίνει στην ουσία το ποσοστό των κυψελίδων που βρίσκονται στην γενιά z. Για να μπορέσουμε να τον χρησιμοποιήσουμε έχουμε κάνει την παραδοχή πως η κυψελίδες διαστέλλονται όλες ταυτόχρονα. Αν και είναι εύκολο, παρατηρώντας προσεκτικά τους όρους ,να κατανοήσει κανείς την παραπάνω σχέση διαισθητικά παρακάτω θα παραθέσουμε την μαθηματική της απόδειξη.

Ισχύει ότι η ογκομετρική παροχή που εισέρχεται από το στόμα Q<sub>0</sub> ισούται με το άθροισμα των ογκομετρικών παροχών που εισέρχονται σε όλες τις κυψελίδες και τους αγωγούς του πνεύμονα. Δηλαδή:

$$Q_0 = \sum_{z=0}^{23} Q_{\alpha,z} + \sum_{z=0}^{23} Q_{d,z} \qquad (3.41)$$

Αντικαθιστώντας τα  $Q_{\alpha,z}$  και όπως το υπολογίσαμε παραπάνω λαμβάνου<br/>με:

$$Q_0 = \sum_{z=0}^{23} Q_{\alpha,z} + \sum_{z=0}^{23} Q_{d,z} = \sum_{z=0}^{23} N_{\alpha,z} \frac{dV_{1a}}{dt} + \sum_{z=0}^{23} Q_{d,z}$$

$$Q_0 - \sum_{z=0}^{23} Q_{d,z} = \sum_{z=0}^{23} N_{a,z} \frac{dV_{1a}}{dt} \quad (3.42)$$

Διαιρώντας κατά μέλη την (3.37) με την (3.42) λαμβάνουμε την:

$$\frac{Q_{a,z}}{Q_0 - \sum_{z=0}^{23} Q_{d,z}} = \frac{N_{a,z} \frac{dV_{1a}}{dt}}{\sum_{z=0}^{23} N_{a,z} \frac{dV_{1a}}{dt}} \qquad (3.43)$$

Εφόσον έχουμε κάνει την παραδοχή πως οι κυψελίδες διαστέλλονται όλες ταυτόχρονα και πως έχουν όλες τον ίδιο όγκο τότε  $\frac{dV_{1a}}{dt} =$ σταθερό ,οπότε το  $V_{a0,z} = N_{a,z} \frac{dV_{1a}}{dt}$ είναι επίσης σταθερό και η (3.43) μπορεί να γραφεί ως:

$$\frac{Q_{a,z}}{Q_0 - \sum_{z=0}^{23} Q_{d,z}} = \frac{V_{a0,z}}{\sum_{z=0}^{23} V_{a0,z}}$$
(3.44)

Λύνοντας την (3.44) ως προ<br/>ς  $Q_{a,z}$  προκύπτει η εξίσωση (3.40)

Επίσης μπορούμε να υπολογίσουμε την εισρο<br/>ή $Q_{z,inlet}(t)$ σε κάθε αεραγωγό $~\omega\varsigma:$ 

$$Q_{z,inlet}(t) = Q_0 - \sum_{j=0}^{z-1} (Q_{d,j} + Q_{\alpha,j}) \quad (3.45)$$



Σχήμα 3.11: Τοπική απόσταση Χz

Το  $Q_{z,inlet}(t)$  αλλάζει προφανώς κατά μήκος του αεραγωγού ανάλογα με το μήκος  $x_z$  (σχήμα 3.1) από την αρχή του αγωγού και γίνεται:

$$Q_{z}(x,t) = Q_{z,inlet}(t) - \frac{x_{z}}{l_{z}} (Q_{d,z} + Q_{\alpha,z}) \quad (3.46)$$

Ακόμα γράφουμε ότι:

$$Q_{a,z} = \frac{d}{dt} (V_{a,z})$$
$$\int_0^t Q_{a,z} dt = \int_{V_{a,z,0}}^{V_{a,z}(t)} dV_{a,z}$$
$$V_{a,z}(t) = V_{a,z,0} + \int_0^t Q_{a,z} dt \quad (3.47)$$

Τέλος θα υπολογίσουμε την διάμετρο κυψελίδας ως εξής:

$$V_{\alpha,o\lambda\iota\kappa\delta\varsigma}(t) = N_a V_{1a} = N_a \frac{\pi d_a^3}{6}$$
$$d_a = \sqrt[3]{\frac{6V_{\alpha,o\lambda\iota\kappa\delta\varsigma}(t)}{\pi N_a}} \quad (3.48)$$

## 3.5 Εξισώσεις διατήρησης μάζας στην εισπνοής και εκπνοή

Οι εξισώσεις διατήρησης μάζας αερολύματος στους αγωγούς και στις κυψελίδες για την εισπνοή και την εκπνοή αποτελούν επί της ουσίας το μαθηματικό μοντέλο του εκάστοτε προβλήματος. Παρακάτω παρουσιάζονται οι εξισώσεις αυτές για την εισπνοή και την εκπνοή και γίνεται επεξήγηση των όρων και τον παραγόντων.

#### Εισπνοή

Η μονοδιάστατη εξίσωση διατήρησης μάζας αερολύματος στους αεραγωγούς της γενιάς z ως προς την x κατεύθυνση κατά την εισπνοή γράφεται ως:

$$\frac{\partial(cA_z)}{\partial t} = -\frac{\partial(cQ_z)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{eff} A_z \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\left( Q_z P_{t,z} + Q_{a,z} \right) c}{l_z} + b \frac{L_{a,z}}{l_z} \quad (3.49)$$



Σχήμα 3.12: Στοιχειώδης τμήμα του αγωγού

Όπου:

 $\frac{\partial(cA_z)}{\partial t}$ : είναι ο όρος για τη συσσώρευση αερολύματος στον διαφορικό κυλινδρικό όγκο dV του αεραγωγό γενιάς z.

 $\frac{\partial(cQ_z)}{\partial x}$ : είναι ο όρος για τη μεταφορά μάζας αερολύματος λόγω συναγωγής κατά μήκος διαφορικού κυλινδρικού όγκου dV του αεραγωγού γενιάς z.

 $\frac{\partial}{\partial x} \left( D_{eff} A_z \frac{\partial c}{\partial x} \right):$  είναι ο όρος για τη μεταφορά μάζας αερολύματος λόγω διάχυσης Brown κατά μήκος διαφορικού κυλινδρικού όγκου dV του αεραγωγού γενιάς z.

 $\frac{Q_z P_{t,z} c}{l_z} = L_z:$ είναι ο όρος που αφορά τον ρυθμό επικάθισης σωματιδίων στα τοιχώματα διαφορικού κυλινδρικού όγκου dV του αεραγωγού γενιάς z ανά μονάδα μήκους του.

 $\frac{Q_{a,z}c}{l_z}$ : είναι ο όρος για τη μεταφορά μάζας αερολύματος με συναγωγή από τον αεραγωγό γενιάς z προς τις κυψελίδες που τον περιβάλλουν.

 $b \frac{L_{a,z}}{l_z}$ : είναι ο όρος που μας δείχνει ποια θα ήταν η επικάθιση σωματιδίων από την κυψελίδα στις οπές που συνδέουν τις κυψελίδες με τον αεραγωγό αν αυτές ήταν κλεισμένες με τοίχωμα σφαιρικής επιφάνειας.

Προφανώς και δεν υπάρχει τοίχωμα στις οπές οπότε τα σωματίδια αυτά από την κυψελίδα εισέρχονται στον αεραγωγό. Παρατίθεται το σχήμα 3.13 που είναι διακριτή με την κόκκινη γραμμή η τομή της επιφάνειας κυψελίδας που λείπει.



Σχήμα 3.13: Επιφάνεια κυψελίδας που εκλείπει

Επιπλέον:

b: είναι το κλάσμα της σφαιρικής επιφάνειας κυψελίδας που λείπει λόγω των οπών

(στην ουσία το ποσοστό επιφάνειας που λείπει σε σχέση με την συνολική επιφάνεια σφαίρας)

 $L_{a,z}$ : ο βαθμός επικάθισης στους σφαιρικούς κυψελιδικούς όγκους της γενιάς z

Η εξίσωση διατήρησης μάζας αερολύματος στον όγκο κυψελίδας γενιάς z για την εισπνοή είναι:

$$\frac{d}{dt}(V_{\alpha,z}c_{\alpha,z}) = \frac{Q_{\alpha,z}}{l_z} \int_0^{l_z} cdx + f_z \int_0^{l_z} L_z dx - L_{\alpha,z}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( V_{a,z} c_{a,z} \right) = f_z \frac{P_{t,z} Q}{l_z} c \Delta x_z + \frac{Q_{a,z}}{l_z} c \Delta x_z - \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( V_{a,z} c_{a,z} \right) = \left( \frac{f_z Q P_{t,z}}{l_z} + \frac{Q_{a,z}}{l_z} \right) \Delta x_z c - \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \quad (3.51)$$

Όπου:

 $\frac{\partial}{\partial t}(V_{a,z}c_{a,z})$ : είναι ο όρος της συσσώρευσης μάζας αερολύματος στην κυψελίδα

 $f_z \frac{P_{t,z} Q}{l_z} c \Delta x_z$ : είναι ο όρος που αφορά το ρυθμό επικάθισης σωματιδίων στην επιφάνεια που θα καταλάμβανε ο αεραγωγός ,στο μέρος που βρίσκεται η οπή ,αν δεν υπήρχε η οπή. Στην ουσία πρόκειται για μια ροή σωματιδίων που εισέρχεται στις κυψελίδες από τον αεραγωγό.

 $\frac{Q_{a,z}}{l_z}$  <br/>  $c\Delta \mathbf{x}_z$ : είναι ο όρος που εκφράζει τη ροή μάζας αερολύματος από τον <br/> αεραγωγό

στις κυψελίδες λόγω συναγωγής.

 $\gamma_z V_{a,z} c_{a,z}$ : είναι ο όρος που αφορά την επικάθιση σωματιδίων στα σφαιρικά τοιχώματα της κυψελίδας.

Ο παράγοντας γ<sub>z</sub> είναι ίσος με 
$$\gamma_z = \left(\frac{3V_{\text{settling}}}{2d_a} + \frac{\gamma D_d}{d_a^2}\right)$$
 (3.52)

Όπου Vsettling η ταχύτητα καθίζησης σωματιδίου και το γ είναι μια εμπειρική παράμετρος ίση  $\gamma = d_a \delta$  και συχνότερα την λαμβάνουμε ίση με 10. Το δ είναι το

πάχος του οριακού στρώματος μέσω του οποίου λαμβάνει χώρα η μεταφορά μάζας από το εσωτερικό της κυψελίδας προς το τοίχωμα της.

#### Εκπνοή

Όπως και με την εισπνοή, για την εκπνοή έχουμε τα ισοζύγια διατήρησης μάζας. Η μονοδιάστατη εξίσωση διατήρησης μάζας αερολύματος στους αεραγωγούς της γενιάς z ως προς την x κατεύθυνση γράφεται ως:

$$\frac{\partial(cA_z)}{\partial t} = -\frac{\partial(cQ_z)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{eff}A_z \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\left( Q_z P_{t,z} - Q_{a,z} \right) c}{l_z} + b \frac{L_{a,z}}{l_z} \quad (3.53)$$

Ο όρος  $\frac{Q_{a,z}c}{l_z}$  εδώ έχει αντίθετο πρόσημο απ' ότι στην εισπνοή και επίσης το πρόσημο της  $Q_z$  εδώ είναι και αυτό αντίθετο απ' ότι στην εισπνοή.

Η εξίσωση διατήρησης μάζας αερολύματος στον όγκο κυψελίδας γενιάς z είναι:

$$\frac{d}{dt}(V_{\alpha,z}c_{\alpha,z}) = -Q_{\alpha,z}c_{\alpha,z} + f_z \int_0^{l_z} L_z dx - L_{\alpha,z}$$

$$\frac{d}{dt}\left(V_{\alpha,z}c_{\alpha,z}\right) = -Q_{\alpha,z}c_{\alpha,z} + f_z \frac{P_{t,z}Q}{l_z}c\Delta x_z - \gamma_z V_{\alpha,z}c_{\alpha,z} \quad (3.54)$$

Το πρόσημο της  $Q_{a,z}$  είναι αντίθετο από αυτό που είχε στην εισπνοή.

# 3.6 Υπολογισμός κατανομής κυψελίδων

Στόχος της παραγράφου αυτής είναι να προβλέψει την κατανομή των κυψελίδων στην περίμετρο των αεραγωγών κάθε γενιάς, σύμφωνα με τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των αεραγωγών και το ποσοστό επικάλυψης τους σε κυψελίδες. Με τη βοήθεια του προγράμματος Excel, χρησιμοποιώντας δεδομένα από τον πίνακα 3.1 για τη διάμετρο, το μήκος των αεραγωγών και το κλάσμα επικάλυψης f κάθε γενιάς z και θεωρώντας όγκο FRC=3200ml και διάμετρο κυψελίδας ίση με 204 μm έγιναν οι εξής υπολογισμοί:

Z	lp(mm)	d <sub>p</sub> (mm)	fz	Sz(mm <sup>2</sup> )	fz*Sz	Vp(mm <sup>3</sup> )
0	120	18	0	6785,84	0	30536,28
1	47,6	12,2	0	3648,771	0	11128,75
2	20,9	9,14	0	2400,504	0	5485,151
3	18,37	6,17	0	2848,618	0	4393,993
4	13,99	4,96	0	3487,942	0	4325,048
5	11,79	3,86	0	4575,104	0	4414,975
6	9,91	3,08	0	6136,973	0	4725,469
7	8,37	2,53	0	8515,415	0	5386
8	7,05	2,05	0	11623,39	0	5956,987
9	5,95	1,7	0	16269,93	0	6914,721
10	5,07	1,43	0	23323,51	0	8338,153
11	3,92	1,16	0	29256,6	0	8484,415
12	3,03	0,94	0	36650,53	0	8612,875
13	2,34	0,76	0	45768,77	0	8696,067
14	1,81	0,62	0	57761,71	0	8953,066
15	1,4	0,5	0,2	72060,6	14412,12	9007,574
16	1,33	0,5	0,4	136915,1	54766,05	17114,39
17	1,12	0,49	0,7	225982	158187,4	27682,8
18	0,93	0,4	1	306360,5	306360,5	30636,05
19	0,83	0,38	1	519495,1	519495,1	49352,04
20	0,7	0,36	1	830138,1	830138,1	74712,43
21	0,7	0,34	1	1568039	1568039	133283,3
22	0,7	0,31	1	2859364	2859364	221600,7
23	0,7	0,29	1	5349779	5349779	387859
				TOTAL:	11660541	1077600

Πίνακας 3.5: Υπολογισμοί στο Excel

Για τον υπολογισμό του όγκου των αεραγωγών σε κάθε γενιά, χρησιμοποιήθηκε ο τύπος :

$$V_{P,z} = 2^{z} \left(\frac{\pi d_{z}^{2}}{4}\right) l_{z}$$
 (3.3)

Για το συνολικό όγκο των αεραγωγών και των 23 γενιών ο τύπος:

$$Sum, V_p = \sum_{z=0}^{23} V_{P,z} \quad (3.55)$$

Για το εμβαδόν της παράπλευρης επιφάνειας των αεραγωγών κάθε γενιάς ο τύπος:

$$S_z = 2^z \pi d_z l_z$$
 (3.56)

Υπολογίστηκαν επίσης τα παρακάτω:

Z	nl	nl(round)	ns	n	Vα,z	Nα,z
15	6,862745	7	2,57276	18,00932	2623,23	590129,356
16	6,519608	7	4,888244	34,21771	9968,273	2242491,55
17	5,490196	6	8,236262	49,41757	28792,57	6477259,81
18	4,558824	5	9,570667	47,85333	55762,37	12544464
19	4,068627	4	10,14311	40,57242	94556,19	21271634,2
20	3,431373	3	10,80559	32,41677	151098	33991450,9
21	3,431373	3	10,20528	30,61584	285407,4	64206073,9
22	3,431373	3	9,304815	27,91444	520448,8	117081664
23	3,431373	3	8,704504	26,11351	973742,9	219056017
	TOTAL:	41		TOTAL:	2122400	477461185

Πινακας 3.6: Συνέχεια υπολογισμών

Ο συνολικός αριθμός κυψελίδων βρέθηκε περίπου ίσος με Na,total=4,77×10<sup>8</sup> και ο συνολικός τους όγκος ίσος με Va,total =2122,4 ml.

Για το συνολικό όγκο κυψελίδων εξ αρχής χρησιμοποιήθηκε η εξής σχέση:

$$\sum_{z=15}^{23} V_{a,z} = Sum, V_{a,z} = FRC - Sum, V_p \qquad (3.57)$$

Έπειτα για τον υπολογισμό του συνολικού όγκου κυψελίδων ανά γενιά:

$$\frac{V_{a,z}}{\sum_{z=15}^{23} V_{a,z}} = \frac{f_z S_z}{\sum_{z=15}^{23} f_z S_z}$$
$$V_{a,z} = \frac{f_z S_z}{\sum_{z=15}^{23} f_z S_z} \sum_{z=15}^{23} V_{a,z} \quad (3.58)$$

Ακόμα για τον συνολικό αριθμό κυψελίδων ανά γενιά:

$$N_{a,z} = \frac{V_{a,z}}{V_{1a}} \qquad (3.59)$$

Και ανά αεραγωγό:

$$n_{a,\alpha\nu\alpha} _{\alpha\varepsilon\rho\alpha\gamma\omega\gamma\delta} = n = \frac{V_{a,z}}{2^z V_{1a}} \qquad (3.60)$$

Όπου: 
$$V_{1a} = \frac{\pi d_a^3}{6} = 4,445 \cdot 10^{-6} ml$$
 (3.61)

Τέλος ο αριθμός των κυψελίδων ανά μήκος του αεραγωγού είναι :

$$n_l = \frac{l_p}{d_a} \qquad (3.62)$$

Ο αριθμός των κυψελίδων ανά περιφέρεια του αεραγωγού είναι :

$$n_s = \frac{n}{n_l} \qquad (3.63)$$

# Κεφάλαιο 4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

## 4.1 Πεπερασμένοι Όγκοι Ελέγχου

Για την διακριτοποίηση του μαθηματικού μοντέλου του προβλήματος μας χρησιμοποιήθηκαν πεπερασμένοι όγκοι ελέγχου. Οι πεπερασμένοι όγκοι ελέγχου είναι από τις μεθόδους που αναπτύχθηκαν πρώτες για την επίλυση προβλημάτων ροής και ως εκ τούτου είναι αρκετά διαδεδομένη. Η χρήση της γίνεται σε ισοζύγια μάζας, ορμής και θερμότητας στη ροή, τα οποία λαμβάνουν την ολοκληρωτική τους μορφή. Κατά συνέπεια , η μέθοδος αυτή ανήκει στις λεγόμενες ολοκληρωτικές μεθόδους αριθμητικής ανάλυσης και επίλυσης.

Συγκεκριμένα στο χωρίο στο οποίο μας ενδιαφέρει να κάνουμε υπολογισμό μιας ποσότητας y (συγκέντρωση μάζας, θερμοκρασία, θερμοροή, ορμή κ.τ.λ.) επιλέγεται ένα υπολογιστικό πλέγμα με συγκεκριμένο αριθμό πλεγματικών σημείων. Έπειτα το χωρίο χωρίζεται σε έναν επιλεγμένο αριθμό μη επικαλυπτόμενων στοιχειωδών όγκων ελέγχου, με τρόπο τέτοιο, ώστε κάθε όγκος ελέγχου να περικλείει ένα μοναδικό πλεγματικό σημείο.



Σχήμα 4.1: Υπολογιστικά πλέγματα όγκων ελέγχου σε 2 διαστάσεις

Η διαφορική εξίσωση που διέπει το προς μελέτη φαινόμενο ολοκληρώνεται «πάνω» σε κάθε έναν όγκο ελέγχου. Σε κάθε όγκο ελέγχου η y θα λαμβάνει μια τιμή, η οποία θα εξαρτάται από το πώς έχουμε επιλέξει να μεταβάλλεται η y στον όγκο αυτό. Δηλαδή , μπορούμε να επιλέξουμε η y να είναι σταθερή (βηματική απεικόνισηπροφίλ) ή να μεταβάλλεται γραμμικά (γραμμική απεικόνιση-προφίλ) στον στοιχειώδη όγκο.



Σχήμα 4.2(a): Βηματική κατανομή, (β): Γραμμική κατανομή

Έχοντας κάνει τα παραπάνω και υποθέτοντας το προφίλ το οποίο θα έχει η μεταβλητή y , βλέπουμε τη μεταβολή της y ανά πλεγματικό σημείο και διακριτοποιούμε την διαφορική εξίσωση διατήρησης. Προκύπτει ότι η τελευταία θα ικανοποιείται σε κάθε όγκο ελέγχου και εν τέλει σε όλο το χωρίο ανεξαρτήτως του κατά πόσο πυκνό είναι το πλέγμα. Αυτό αποτελεί ένα πλεονέκτημα της μεθόδου σε αντίθεση με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών όπου σε αρκετά προβλήματα χρειάζεται να πυκνώσουμε πάνω από ένα όριο το υπολογιστικό μας πλέγμα ώστε να λάβουμε αποτελέσματα τα οποία είναι ευσταθή και συγκλίνουν. Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα γίνει αριθμητική ανάλυση με πεπερασμένως όγκους κατά μήκος των αεραγωγών και η διακριτοποίηση θα γίνει σε πλέγμα μιας διάστασης, διότι μας ενδιαφέρει κυρίως τι συμβαίνει κατά μήκος των αεραγωγών, καθώς προχωράμε βαθύτερα στον πνεύμονα.

## 4.2 Διακριτοποίηση μερικών τυπικών προβλημάτων

### Μεταφορά μάζας με μοριακή διάχυση σε μόνιμες συνθήκες

Σε αυτήν την ενότητα θα γίνει η διακριτοποίηση της εξίσωσης προβλήματος μονοδιάστατης μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση σε μόνιμες συνθήκες, δηλαδή η μεταβλητή του χρόνου δεν θα διαδραματίσει κανένα ρόλο στην εξέλιξη του φαινομένου. Έστω η μονοδιάστατη εξίσωση μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση:

$$\frac{d}{dx}\left(D_{eff}\,\frac{dc}{dx}\right) + S = 0 \tag{4.1}$$

Όπου:

D<sub>eff</sub> : η ενεργή διαχυτότητα (effective diffusivity)
c : η συγκέντρωση του αερολύματος
S: ο όρος πηγής ανά μονάδα όγκου

Η εξίσωση θα λάβει την ολοκληρωτική της μορφή στο υπολογιστικό πλέγμα μιας διάστασης που φαίνεται παρακάτω:



Σχήμα 4.3: Υπολογιστικό πλέγμα με κόμβμους W,P,E,με μέτωπα w,e και διάστημα Δx.

Οι διακεκομμένες γραμμές συμβολίζουν τα όρια του κεντρικού όγκου ελέγχου P με τον «δυτικό - west » κόμβο στα αριστερά και τον «ανατολικό – east» δεξιά. Θεωρούμε ότι το μήκος των όγκων ελέγχου είναι  $\Delta x$ , το ύψος 1 και το πλάτος 1. Δηλαδή ο στοιχειώδης όγκος μας έχει όγκο ( $\Delta x$ )×(1)×(1). Ολοκληρώνοντας, λοιπόν, στο πλέγμα την (4.1) λαμβάνουμε την εξίσωση:

$$\left(D_{eff}\frac{dc}{dx}\right)_{e} - \left(D_{eff}\frac{dc}{dx}\right)_{w} + \int_{w}^{e} Sdx = 0 \quad (4.2)$$

Είναι προφανές, ότι στην συγκεκριμένη περίπτωση, αν θεωρήσω ένα βηματικό προφίλ για τη μεταβλητή συγκέντρωσης c θα αντιμετωπίσω πρόβλημα στον ορισμό της κλίσης  $\frac{dc}{dx}$ . Έτσι , θεωρώ ένα γραμμικό προφίλ για την μεταβλητή συγκέντρωσης c. Οπότε, η διακριτοποιημένη εξίσωση γράφεται ως:

$$\left(D_{eff}\right)_{e} \frac{Ce - Cp}{\delta x_{e}} - \left(D_{eff}\right)_{w} \frac{Cp - Cw}{\delta x_{w}} + \bar{S}\Delta x = 0 \quad (4.3)$$

Όπου:

# $\stackrel{-}{\rm S}$ : μια μέση τιμή για τον όρο πηγής S στον όγκο ελέγχου

Η εξίσωση (4.3) διακριτοποιείται και παίρνει της εξής μορφή:

$$a_p C_p = a_e C_e + a_w C_w + B \quad (4.4)$$

Όπου:

$$a_e = \frac{\left(D_{eff}\right)_e}{\delta x_e} \ (4.4a)$$

$$a_w = \frac{\left(D_{eff}\right)_w}{\delta x_w} \ (4.4b)$$
$$a_p = \left(\frac{\left(D_{eff}\right)_e}{\delta x_e} + \frac{\left(D_{eff}\right)_w}{\delta x_w}\right),$$

$$\dot{\alpha}\rho\alpha \ a_p = a_e + a_w \ (4.4c)$$

$$B = \bar{S}\Delta x \ (4.4d)$$

Για μεγαλύτερη ακρίβεια και ορθότητα ο όρος  $\bar{S}$  θα γραφεί ως γραμμική σχέση της  $C_p$  όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\bar{S} = S_c + S_p C_p \quad (4.5)$$

Όπου:

$$S_c$$
 : ο σταθερός όρος πηγής $S_p$  : ο συντελεστής της  $Cp$ 

Η εμφάνιση του Cp στην έκφραση (4.5) δηλώνει την υπερίσχυση του στον όγκο έλεγχο. Αυτό σημαίνει ότι για το όρο της πηγής υποθέσαμε βηματικό προφίλ σε αντίθεση, όπως έχει ήδη αναφερθεί παραπάνω, με τον όρο  $\frac{dc}{dx}$  που θεωρήθηκε το γραμμικό προφίλ.

Μετά τις παραπάνω αλλαγές η νέα διακριτοποιημένη διαφορική εξίσωση θα πάρει την μορφή:

$$a_P c_P = a_E c_E + a_W c_W + B \quad (4.6)$$

$$a_E = \frac{D_{eff_e}}{(\delta \mathbf{x})_e} \tag{4.6a}$$

$$a_W = \frac{D_{eff_W}}{(\delta \mathbf{x})_W} \tag{4.6b}$$

$$a_P = a_E + a_W - S_P \Delta \mathbf{x} \tag{4.6c}$$

$$B = S_C \Delta \mathbf{x} \tag{4.6d}$$

#### Οι τέσσερεις βασικοί κανόνες

Με βάση τον Suhas V. Patankar (1980) οι παραπάνω διακριτοποιημένες εξισώσεις πρέπει να υπακούνε σε τέσσερεις βασικούς κανόνες ώστε να εξασφαλίζεται μια ικανοποιητική προσέγγιση της πραγματικότητας και μια ολική ισορροπία στο εκάστοτε πρόβλημα. Οι κανόνες αυτοί είναι οι εξής:

## 1<sup>ος</sup> Κανόνας

Συνοχή: Απαραίτητη είναι η συνοχή στα μέτωπα των ορίων των όγκων ελέγχου. Αυτό σημαίνει ότι για κοινό όριο μεταξύ δυο γειτονικών όγκων ελέγχου, η ροή μιας ποσότητας, δια μέσου αυτής της επιφάνειας, θα πρέπει να εκφράζεται με την ίδια σχέση στις εξισώσεις διακριτοποίησης και για τους δύο όγκους.

Είναι προφανές ότι η ροή που εξέρχεται π.χ. από δεξιό σύνορο του όγκου W θα πρέπει να ταυτίζεται με τη ροή που εισέρχεται από το ίδιο σύνορο στον όγκο P, ώστε να ικανοποιείτε η εξίσωση συνέχειας.

## 2<sup>ος</sup> Κανόνας

<u>Θετικοί συντελεστές</u>: Οι συντελεστές του κεντρικού σημείου  $a_p$  και οι πριν και μετά γειτονικοί του συντελεστές  $a_{nb}$  της εξίσωσης (4.4) ,εκφρασμένη στην γενικευμένη της μορφή ως  $a_pC_p = \sum a_{nb}C_{nb} + B$ , πρέπει να έχουν πάντα το ίδιο πρόσημο και να είναι ,κατά σύμβαση στην συγκεκριμένη εργασία, πάντα θετικοί.

Ο λόγος είναι ότι οι τιμές των C μεταξύ γειτονικών σημείων πρέπει να ακολουθούν ταυτόχρονα την ίδια ανοδική η καθοδική πορεία. Π.χ. αν η τιμή  $C_p$  αυξηθεί θα πρέπει αναγκαστικά και λογικά να αυξηθεί η τιμή της  $C_w$ .

#### 3ος Κανόνας

<u>Αρνητικότητα της κλίσης του  $\overline{S}$ </u>. Όταν γραμμικοποιούμέ τον όρο  $\overline{S}$  ως  $\overline{S} = S_c + S_p C_p$ θα πρέπει ο όρος  $S_p$  να είναι πάντα ίσος ή μικρότερος του μηδενός.

Απαιτούμε να συμβαίνει ο  $3^{\circ\varsigma}$  κανόνας για να εξασφαλίσουμε ότι ο συντελεστής  $a_p$ θα είναι πάντα θετικός, διότι αν δεν ισχύει η αρνητικότητα του  $S_p$ , τότε υπάρχει περίπτωση ο συντελεστής  $a_p$ να λάβει αρνητικό πρόσημο, γεγονός που δεν υπακούει στον  $2^{\circ}$  κανόνα.

#### 4°ς Κανόνας

<u>Άθροισμα των συντελεστών γειτονικών όγκων:</u> Απαιτούμε πάντα  $a_p = \sum a_{nb}$ , για όλες τις περιπτώσεις όπου η αρχική διαφορική εξίσωση έχει την ιδιότητα να ικανοποιείτε αν στην εξαρτημένη της μεταβλητή c προστεθεί μια σταθερά λ, δηλαδή υπάρξει μεταβολή της c σε c+λ.

#### Διακριτοποίηση προβλήματος μεταφοράς μάζας με συναγωγή και διαχυση

Η εξίσωση συνέχειας μάζας στις τρείς διαστάσεις :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (4.7)$$

Αντίστοιχα ,γράφεται η γενική διαφορική εξίσωση μεταφοράς μάζας :

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j c)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( D_{eff} \ \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + S \quad (4.8)$$

Η (4.8) ξαναγράφεται ως:

$$\rho \frac{\partial c}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + S \quad (4.9)$$

Όπου:

j: ο δείκτης που παίρνει τιμές 1,2,3 ανάλογα με την διεύθυνση

Η παραπάνω εξίσωση ,<br/>έχοντας συγκεκριμένες κατανομές των ρ , $u_j$ , Γ και S, ικανοποιείται για κάποια τιμή της c και ταυτόχρονα για την τιμή c+λ όπου λ σταθερά. Αυτό προφανώς μας δείχνει ότι ο 4<sup>ος</sup> κανόνας ικανοποιείται.

# Διακριτοποίηση προβλήματος μονοδιάστατης μεταφοράς μάζας με συναγωγή και διάχυση σε μόνιμες συνθήκες

Η εξίσωση διατήρησης μάζας γίνεται:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0$$
 ή ρu = σταθερή (4.7.a)

Και η εξίσωση μεταφοράς γίνεται :

$$\frac{d(\rho uc)}{dx} = \frac{d}{dx} \left( \Gamma \frac{dc}{dx} \right)$$
(4.8. *a*)

Για την διακριτοποίηση θα θεωρηθεί το πλέγμα που παρουσιάστηκε στο σχήμα 4.3. Είναι βολικό να θεωρήσουμε ότι το ε βρίσκεται στο μέσο των P και E και το w στο μέσο των W και P.

Από την ολοκλήρωση της εξίσωσης (4.8. a) προκύπτει :

$$(\rho uc)_e - (\rho uc)_w = \left(\Gamma \frac{dc}{dx}\right)_e - \left(\Gamma \frac{dc}{dx}\right)_w \quad (4.8.b)$$

Για το όρο της κλίσης της συγκέντρωσης θα χρησιμοποιηθεί και εδώ γραμμικό προφίλ για το λόγο που προαναφέρθηκε. Το ίδιο θα κάνουμε και με τον όρο συναγωγής . Έτσι, για τον όρο συναγωγής , έχουμε:

$$c_e = \frac{1}{2}(c_E + c_P)$$
 (4.10a) και  $c_w = \frac{1}{2}(c_W + c_P)$  (4.10b)

Αντικαθιστώντας την (4.10a) και (4.10b) στην (4.8. b) λαμβάνουμε την παρακάτω εξίσωση:

$$(\rho uc)_e - (\rho uc)_w = \Gamma_e \frac{c_E - c_P}{\delta x_e} - \Gamma_w \frac{c_P - c_W}{\delta x_w} \quad (4.8c)$$

Θέτω F=ρu και D=Γ/δx , όπου F δύναμη συναγωγής και D αγωγιμότητα διάχυσης. Η διαφορική εξίσωση γράφεται τώρα ως:

$$a_P c_P = a_E c_E + a_W c_W \quad (4.9)$$

Όπου:

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} (4.9a)$$

$$a_W = D_w + \frac{F_w}{2} (4.9b)$$

$$a_P = D_e + \frac{F_e}{2} + D_w - \frac{F_w}{2} = a_E + a_W + (F_e - F_w) (4.9c)$$

Η παραπάνω διακριτοποίηση μας δείχνει ότι είναι δυνατόν να συμβεί παραβίαση του  $4^{00}$  κανόνα σε ορισμένες περιπτώσεις. Όταν ισχύει F>2D τότε οι συντελεστές  $a_E$  και  $a_W$  μπορούν να λάβουν αρνητικές τιμές ανάλογα με το αν το F είναι θετικό ή αρνητικό. Οι αρνητικοί συντελεστές μπορεί να είναι μια ισχυρή ένδειξη ότι το  $a_P$  είναι μικρότερο του  $\sum a_{nb}$  με αποτέλεσμα να μην ικανοποιείται η απαίτηση του  $4^{00}$  κανόνα.

Ακόμα στη περίπτωση της μηδενικής διάχυσης προκύπτει η εξίσωση (4.9) να είναι ακατάλληλη προς επίλυση. Είναι φανερό λοιπόν ότι το παραπάνω σχήμα κεντρικών

διαφορών μπορεί να οδηγήσει σε μη λογικά αποτελέσματα και σε απόκλιση της λύσης. Θα μπορούσε να λειτουργήσει ικανοποιητικά μόνο χαμηλές τιμές του λόγου F/D ,δηλαδή για χαμηλό αριθμό Reynolds.

#### Διακριτοποίηση με σχήμα ανάντη διαφορών (upwind)

Για να ξεπεραστούν τα παραπάνω προβλήματα που προκύπτουν θα κάνουμε διακριτοποίηση με το σχήμα upwind που είναι κατ' ουσίαν ένα σχήμα ανάντη διαφορών.

Θα τροποποιηθούν οι παραδοχές  $c_e = \frac{1}{2}(c_E + c_P)$  και  $c_w = \frac{1}{2}(c_W + c_P)$  και η τιμή του  $c_e$  στη διεπιφάνεια των όγκων ελέγχου θα γίνει ίση με την τιμή πάνω στην πλεγματική θέση όπως φαίνεται παρακάτω:

$$c_e = c_P \quad \alpha v \quad F_e > 0 \quad (4.10a)$$
  
 $\dot{\eta}$   
 $c_e = c_E \quad \alpha v \quad F_e < 0 \quad (4.10b)$ 

Όμοια για το c<sub>w</sub> έχουμε:

$$c_w = c_W \quad \alpha \nu \quad F_e > 0 (4.10c)$$
  
 $\dot{\eta}$   
 $c_w = c_P \quad \alpha \nu \quad F_e < 0 (4.10d)$ 

Επαναδιατυπώνοντας τις εξισώσεις:

$$F_e c_e = c_P \max[F_e, 0] - c_E \max[-F_e, 0]$$
 (4.11)

Έτσι η νέα εξίσωση διακριτοποίησης γίνεται:

$$a_P c_P = a_E c_E + a_W c_W (4.12)$$

Όπου:

$$a_E = D_e + \max[-F_e, 0]$$
 (4.12a)

# $a_W = D_W + \max[F_{w,0}]$ (4.12b)

$$a_P = D_e + \max[F_e, 0] + D_w + \max[-F_w, 0] = a_E + a_W + (F_e - F_w)$$
 (4.12c)

Από τις παραπάνω εξισώσεις είναι εμφανές ότι η λύση θα είναι ρεαλιστική γιατί δεν υπάρχει πιθανότητα παραβίασης του 4<sup>ου</sup> κανόνα όπως γινόταν με την προγενέστερη διακριτοποίηση που είχαμε χρησιμοποιήσει.

#### Μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση για μη μόνιμες συνθήκες

Σε αυτήν την περίπτωση θα γίνει η διακριτοποίηση της εξίσωσης προβλήματος μονοδιάστατης μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση σε μη μόνιμες συνθήκες, δηλαδή η μεταβλητή του χρόνου θα διαδραματίσει σημαντικό ρόλο στην εξέλιξη του φαινομένου. Έστω η μονοδιάστατη εξίσωση μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση σε μη μόνιμες συνθήκες:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (4.13)$$

Χρησιμοποιούμε ξανά την ίδια μορφή στο υπολογιστικό πλέγμα μιας διάστασης που φαίνεται παρακάτω:



Σχήμα 4.3: Υπολογιστικό πλέγμα με κόμβμους W,P,E,με μέτωπα w,e και διάστημα Δx.

Γνωρίζοντας την κατανομή και τις τιμές της συγκέντρωσης c για τα διάφορα σημεία (κόμβοι) του πλέγματος για δεδομένη χρονική στιγμή t, αναζητούμε τις τιμές των συγκεντρώσεων για τα αντίστοιχα σημεία για την επόμενη χρονική στιγμή t+Δt.

Ολοκληρώνοντας την εξίσωση (4.13) για το διάστημα (WE) του πλέγματος προκύπτει:

$$\int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial c}{\partial t} dt dx = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} (D_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x}) dx dt$$

Συμβολίζουμε τις γνωστές τιμές της συγκέντρωσης την χρονική στιγμή t στους κόμβους ως  $c^n$  και τις άγνωστες τιμές της συγκέντρωσης τη χρονική στιγμή t+ $\Delta t$  ως  $c^{n+1}$ . Ακόμη, ισχύει:

$$\int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial c}{\partial t} dt dx = \Delta x (c_{P}^{n+1} - c_{P}^{n}) (4.14)$$

Επομένως, προκύπτει:

$$\Delta x(c_P^{n+1} - c_P^n) = \int_t^{t+\Delta t} \left[ D_{\text{eff},e} \frac{c_E - c_P}{(\delta x)_e} - D_{\text{eff},w} \frac{c_P - c_W}{(\delta x)_w} \right] dt \quad (4.15)$$

Όσον αναφορά την μεταβολή της συγκέντρωση c στους κόμβους W, P,E από τη χρονική στιγμή t στην t+Δt υποθέτουμε:

$$\int_{t}^{t+\Delta t} c_{P} dt = \left[ f c_{P}^{n+1} + (1-f) c_{P}^{n} \right] \Delta t (4.16)$$

Όπου:

f: συντελεστής βαρύτητας, με  $0 \leq \!\! f \leq 1$ 

Τελικά, η εξίσωση (4.14) διαμορφώνεται ως εξής:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} (c_P^{n+1} - c_P^n) = f \left( D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \right) + (1 - f) \left( D_{\text{eff},e}^n \frac{c_E^n - c_P^n}{(\delta x)_e} - D_{\text{eff},w}^n \frac{c_P^n - c_W^n}{(\delta x)_w} \right) (4.17)$$

Μετά τις παραπάνω αλλαγές η διακριτοποιημένη διαφορική εξίσωση θα πάρει την μορφή:

$$a_{P}c_{P}^{n+1} = a_{E}[fc_{E}^{n+1} + (1-f)c_{E}^{n}] + a_{W}[fc_{W}^{n+1} + (1-f)c_{W}^{n}] + [a_{P}^{n} - (1-f)a_{E} - (1-f)a_{W}]c_{P}^{n}$$
(4.18)

Όπου:

$$a_E = \frac{D_{eff,e}^{n+1}}{(\delta \mathbf{x})_e} \quad (4.18a)$$

$$a_W = \frac{D_{eff,w}^{n+1}}{(\delta x)_w} \qquad (4.18b)$$

$$a_P{}^n = \frac{\Delta x}{\Delta t} \tag{4.18c}$$

$$a_P = f a_E + f a_W + a_P{}^n$$
 (4.18*d*)

## 4.3 Χωρική Διακριτοποίηση

Για την χωρική διακριτοποίηση των εξισώσεων διατήρησης μάζας του αερολύματος στους πνεύμονες, θα χρησιμοποιήσουμε όγκο ελέγχου ο οποίος θα αποτελείται από ένα κυλινδρικό τμήμα (του αγωγού) το οποίο θα περιβάλλεται γύρω του από κυψελίδες. Συγκεκριμένα, οι κυψελίδες θα επικαλύπτουν το τμήμα του αγωγού εφαπτομενικά και με τρόπο τέτοιο ώστε να τοποθετείται ο κατά το δυνατόν μέγιστος αριθμός κυψελίδων. Οπότε το κενό μεταξύ κυψελίδας με κυψελίδα είναι σχεδόν μηδέν. Επιπλέον, το μήκος του τμήματος του αγωγού dx θα είναι ίσο με τη διάμετρο της κυψελίδας όπου θεωρείται ίση με 200 μm. Το dx αποτελεί επίσης το χωρικό μας βήμα. Τα παρακάτω σχήματα απεικονίζουν την παραπάνω περιγραφή.



Σχήμα 4.4:Παρουσίαση της εγκάρσιας τομής του όγκου ελέγχου κατά τη διαδικασία της εισπνοής που έχει τη μορφή δακτυλίου, ο οποίος φέρει στη περίμετρο του τις κυψελίδες που θεωρούμε ότι είναι σφαιρικού σχήματος.

Στο σχήμα 4.5 φαίνεται η τομή του όγκου ελέγχου. Οι κυψελίδες που περιβάλλουν το τμήμα του αεραγωγού θα θεωρηθούν ως ένας δακτύλιος με συγκεκριμένο όγκο. Οι παραδοχές που έχουμε κάνει έως τώρα είναι ικανοποιητικές για τις γενιές όπου έχουν βαθμό επικάλυψης των αεραγωγών ίσο με μονάδα (f=1), όπου σε αυτές ο όγκος του δακτυλίου είναι μέγιστος .Το ίδιο ισχύει για τις γενιές που έχουνε βαθμό επικάλυψης μικρότερο της μονάδας, με τη μόνη διαφορά ότι οι δακτύλιοι θα έχουν μικρότερο όγκο από τον μέγιστο, λόγω ότι αποτελούνται από λιγότερες κυψελίδες.



Σχήμα 4.5: Παρουσίαση στοιχειώδους όγκου ελέγχου.



Σχήμα 4.6:Παρουσίαση του πεπερασμένου όγκου ελέγχου σε μορφή δακτυλίων κατά τη διαδικασία της εισπνοής, για τα σημέια W,P,E.

Σε ένα τυχαίο όγκο ελέγχου P θεωρούμε ότι η συγκέντρωση στις κυψελίδες της περιφέρειας είναι σε όλες η ίδια και ίση με  $c_{a,P}$ . Η συγκέντρωση στο κέντρο του δακτυλίου είναι ίση με  $c_P$ .

Το προς εξέταση πρόβλημα είναι μονοδιάστατο ως προς την χωρική κατεύθυνση x η οποία είναι στην ουσία το βάθος και ξεκινάει να μετράει από x=0 (είσοδος της τραχείας ,μηδενική γενιά αεραγωγών z=0).

Με βάση το μοντέλο της τρομπέτας (Trumpet model), υπάρχει συμμετρία μεταξύ των αεραγωγών της κάθε γενιάς και έτσι ο αριθμός των κόμβων διακριτοποίησης θα είναι ο ίδιος για κάθε αεραγωγό της ίδιας γενιάς. Στις γενιές που δεν περιέχουν κυψελίδες ( $0 \le z \le 14$ ) χωρίζουμε το μήκος  $l_z$  του αεραγωγού της κάθε γενιάς, και επομένως ολόκληρη την εκάστοτε γενιά λόγω της συμμετρίας που υπάρχει, σε N ίσα διαστήματα μήκους  $\Delta x_z$  δηλαδή έχουμε N κόμβους- όγκους ελέγχου.

Το μήκος του κάθε διαστήματος υπολογίζεται σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο :

$$dx_z = \Delta x_z = \frac{l_z}{N} \qquad (4.19)$$

Είναι γνωστό ότι το μήκος των αεραγωγών διαφοροποιείται από γενιά σε γενιά, ενώ ο αριθμός των διαστημάτων N που τις χωρίζουμε παραμένει σταθερός. Έτσι, το  $\Delta x_z$  μεταβάλλεται όταν αλλάζουμε γενιά. Οπότε, χωρίζοντας την καθεμία από τις 15 (δηλαδή από την 0 έως και την 14) γενιές σε N ίσα διαστήματα, σημαίνει ότι συνολικά θα έχουμε 15N κόμβους –όγκους ελέγχου.

Για τις γενιές αεραγωγών με κυψελίδες γνωρίζουμε τον αριθμό των διαστημάτων που θα τις χωρίσουμε και αυτός είναι ίσος με το  $n_l$  που το έχουμε υπολογίσει και παρατίθεται στον πίνακα 3.6. Έτσι προκύπτουν συνολικά για όλες τις γενιές 15N+41 κόμβοι- όγκοι ελέγχου.

Στην συνέχεια, με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων, η οποία έχει ήδη περιγραφεί, θα επιλύσουμε αριθμητικά τις εξισώσεις διατήρησης μάζας του αερολύματος στους αεραγωγούς και στις κυψελίδες κατά τη διαδικασία της εισπνοής και της εκπνοής με βάση τον όγκο ελέγχου που παρουσιάσαμε παραπάνω.

# 4.4 Χρονική Διακριτοποίηση

Συμβολίζουμε όπως έχει αναφερθεί με Tinh συμβολίζουμε τον χρόνο εισπνοής και με Texh τον χρόνο εκπνοής. Είναι ευνόητο ότι ο συνολικός κύκλος (χρόνος T) της αναπνοής προσθέτοντας τους δύο παραπάνω χρόνους.

$$T = Tinh + Texh (4.20)$$

Διακριτοποιόντας το πρόβλημα ως προς τη χρονική του διάσταση γράφουμε τα εξής:

$$\Delta t_1 = \frac{\mathrm{Tinh}}{M} \ (4.20a)$$

$$\Delta t_2 = \frac{\text{Texh}}{M} (4.20b)$$

Όπου το t ανήκει στο πεδίο ορισμού [0, Tinh] κατά τη διάρκεια της εισπνοής και στο [Tinh ,T] κατά τη διάρκεια της εκπνοής. Τα Tinh και Texh χωρίζονται όπως φαίνεται σε M διαστήματα με M+ 1 κόμβους. Είναι φανερό ότι τα διαστήματα  $\Delta t_1$  και  $\Delta t_2$  είναι άνισα .Η ισότητα μεταξύ τους θα ίσχυε αν ο χρόνος εισπνοής είναι ίσος με το χρόνο εκπνοής. Στην πραγματικότητα κάτι τέτοιο δεν είναι απόλυτο ότι συμβαίνει . Αυτό δεν μας δυσκολεύει στη δόμηση του αριθμητικού σχήματος γιατί η διακριτοποίηση για την εισπνοή και την εκπνοή θα γίνει ξεχωριστά.

#### 4.5 Διακριτοποίηση εξισώσεων για εισπνοή στους αεραγωγούς

Ξαναγράφουμε την εξίσωση διατήρησης μάζας του αερολύματος σε αεραγωγό γενιάς z :

$$\frac{\partial}{\partial t}(cA) = -\frac{\partial}{\partial x}(cQ) + \frac{\partial}{\partial x}\left(AD_{\text{eff}}\frac{\partial c}{\partial x}\right) - \left(\frac{Q_{a,z} + QP_{t,z}}{l_z}\right)c + \left(\frac{b\gamma_z V_{a,z}}{l_z}\right)c_{a,z} \quad (4.21)$$

Η εξίσωση θα διακριτοποιηθεί με την μέθοδο πεπερασμένων όγκων με όμοιο τρόπο με τις προηγούμενες διακριτοποιήσεις που παραθέσαμε. Παραθέτεται πάλι το πλέγμα του σχήματος (4.3) για διευκόλυνση της τρέχουσας διακριτοποίησης.



Σχήμα 4.3: Υπολογιστικό πλέγμα με κόμβμους W,P,E,με μέτωπα w,e και διάστημα Δx.

Ο όγκος ελέγχου που έχουμε εδώ ,έστω για z γενιά, είναι Vz=AzΔx ,όπου το Az είναι το εμβαδόν της επιφάνειας του αγωγού, η οποία είναι κάθετη στη ροή. Θα απαιτήσουμε την ικανοποίηση της εξίσωσης διατήρησης στον όγκο ελέγχου, όπως θα ήταν αναμενόμενο βέβαια αφού αυτή είναι και η λογική της μεθόδου των πεπερασμένων όγκων. Η παραπάνω απαίτηση είναι ορθή και εφικτή.

Ολοκληρώνοντας λοιπόν, την εξίσωση διατήρησης μάζας στον όγκο ελέγχου P, λαμβάνουμε την παρακάτω:

$$\int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (cA) dt dx = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ -\frac{\partial}{\partial x} (cQ) + \frac{\partial}{\partial x} \left( AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \left( \frac{Q_{a,z} + QP_{t,z}}{l_{z}} \right) c + \left( \frac{b\gamma_{z} V_{a,z}}{l_{z}} \right) c_{a,z} \right] dt dx \quad (4.22)$$

Θα ξεκινήσουμε την διακριτοποίηση των όρων της ολοκληρωμένης εξίσωσης (4.22) με τη σειρά. Θέτω τον όρο της συσσώρευσης στον αγωγό ως:

$$R_1 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (cA) \, dt \, dx = \int_w^e (c(t+\Delta t)A(t+\Delta t) - c(t)A(t)) dx \quad (4.22a)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε τους παρακάτω συμβολισμούς για τις χρονικές μεταβολές της συγκέντρωσης στον αγωγό και της διατομής του αγωγού αντίστοιχα:

$$c(t) = c(n\Delta t) = c^n \tag{4.23a}$$

$$c(t + \Delta t) = c((n+1)\Delta t) = c^{n+1} \quad (4.23b)$$

και

$$A(t) = A(n\Delta t) = A^{n}$$
(4.23c)  
$$A(t + \Delta t) = A((n + 1)\Delta t) = A^{n+1}$$
(4.23d)

Όπότε η (4.22a) γράφεται ως:

$$R_{1} = \left(c_{P}^{n+1}A_{P}^{n+1} - c_{P}^{n}A_{P}^{n}\right)\Delta x \ (4.22a')$$

Βλέπουμε πως για τη διακριτοποίηση ως προς το χρόνο έχει χρησιμοποιηθεί κατάντη σχήμα, όπου η πληροφορία λαμβάνεται για την εκάστοτε μεταβλητή από την καινούργια της τιμή, πράγμα λογικό λόγω της φύσεως του χρόνου όπου στην κλασική φυσική θεωρείται γραμμικός. Αν όχι σε όλα στα περισσότερα προβλήματα η διακριτοποίηση ως προς το χρόνο γίνεται πάντα με κατάντη διαφορές.

Στη συνέχεια γράφουμε τον δεύτερο όρο ,τον όρο συναγωγής, κατά μήκος του αγωγού ως εξής:

$$R_{2} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \left[-\frac{\partial}{\partial x}(cQ)\right] dt dx = -\int_{t}^{t+\Delta t} \int_{w}^{e} \left[\frac{\partial}{\partial x}(cQ)\right] dx dt =$$
$$= -\int_{t}^{t+\Delta t} \left[(cQ)_{e} - (cQ)_{w}\right] dt$$

$$R_2 = -\int_t^{t+\Delta t} [(cQ)_e] dt + \int_t^{t+\Delta t} [(cQ)_w] dt$$

$$= -Q_e^{n+1} \int_t^{t+\Delta t} c_e dt + Q_w^{n+1} \int_t^{t+\Delta t} c_w dt \quad (4.22b)$$

Όπου θεωρούμε ότι η ογκομετρική παροχή είναι σταθερή με το χρόνο ,δηλαδή για συγκεκριμένη θέση στο χωρικό πλέγμα για το t και το t+Δt ισχύει ότι  $Q^n = Q^{n+1}$  και αντίστοιχα για το t+Δt και το t+2Δt ισχύει ότι  $Q^{n+1} = Q^{n+2}$  κ.ο.κ. Αυτή η θεώρηση είναι σωστή με την προϋπόθεση ότι το ρευστό που διέρχεται από τον αεραγωγό είναι ασυμπίεστο, πράγμα που ισχύει στην περίπτωση μας λόγω ότι το ρευστό είναι αέρας σε πίεση πολύ χαμηλότερη της ατμοσφαιρικής.

Όπως έχει ήδη αναφερθεί προηγουμένως, αν στο  $c_e$  δοθεί η μέση τιμή των τιμών της c στους κόμβους που βρίσκονται εκατέρωθεν του e ,δηλαδή  $c_e = \frac{1}{2}(c_E + c_P)$ , και το ίδιο για το  $c_w$  αντίστοιχα, τότε οδηγούμαστε σε ένα σχήμα κεντρικών διαφορών.

Το σχήμα κεντρικών διαφορών ,όπως αναφέρθηκε, θα δημιουργήσει προβλήματα στην επίλυση του αριθμητικού σχήματος. Αυτό είναι λογικό να συμβαίνει διότι, περάν της ανάλυσης που έγινε πριν , γνωρίζουμε ότι για τη διακριτοπόιηση όρων συναγωγής χρησιμοποιούμε πάντα σχήματα ανάντη διαφορών. Η ίδια η φύση της συναγωγής μας το υποδεικνύει, λόγω του ότι υπάρχει προτιμητέα κατεύθυνση στο χώρο και αυτή είναι η κατεύθυνση της ταχύτητας. Οπότε είναι διαισθητικά και μόνο αντιληπτό ,ότι η πληροφορία μας για την τιμή της μεταβλητής, πρέπει να λαμβάνεται από προηγούμενους χωρικούς κόμβους. Έτσι, λόγω των παραπάνω και λόγω ότι διακριτοποιούμε για την εισπνοή όπου η ταχύτητα έχει κατεύθυνση από έξω προς τα μέσα, στα  $c_e$  και  $c_w$  θα δώσουμε τις τιμές  $c_P$  και  $c_W$  αντίστοιχα. Δηλαδή, στο κάθε μέτωπο δίνουμε την τιμή του προηγούμενου κόμβου. Επομένως, καταλήγουμε στο upwind σχήμα για  $F_e > 0$  που είναι ένα σχήμα ανάντη διαφορών.

Όποτε ο δεύτερος όρος γίνεται:

$$R_2 = \left[ -Q_e^{n+1} c_P^{n+1} + Q_w^{n+1} c_W^{n+1} \right] \Delta t \ (4.22b')$$

Επιπλέον, είναι φανερό ότι επειδή χρησιμοποιούμε τις τιμές των c στην καινούργια χρονική στιγμή ότι το σχήμα είναι ένα πλήρως άρρητο.

Για τον τρίτο όρο ισχύει :

$$R_{3} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left( AD_{eff} \frac{\partial c}{\partial x} \right) dt \, dx = \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{w}^{e} \frac{\partial}{\partial x} \left( AD_{eff} \frac{\partial c}{\partial x} \right) dx dt$$
$$R_{3} = \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ (AD_{eff} \frac{\partial c}{\partial x})_{e} - (AD_{eff} \frac{\partial c}{\partial x})_{w} \right] dt$$

$$R_{3} = A_{e}^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{c_{E} - c_{P}}{(\delta x)_{e}} dt - A_{w}^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{c_{P} - c_{w}}{(\delta x)_{w}} dt$$

$$R_{3} = \Delta t \left[ A_{e}^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_{E}^{n+1} - c_{P}^{n+1}}{(\delta x)_{e}} - A_{w}^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_{P}^{n+1} - c_{W}^{n+1}}{(\delta x)_{w}} \right] (4.22c)$$

Όμοια με την ογκομετρική παροχή Q, έτσι, και για την διαχυτότητα θεωρούμε σταθερή την τιμή της στο χρόνο για μία συγκεκριμένη θέση. Οπότε, ισχύει για το t και το t+ $\Delta$ t ότι  $D_{\text{eff},e}^{n} = D_{\text{eff}}^{n+1}$ .

Όταν βρισκόμαστε στο σημείο που αλλάζουμε γενιά αεραγωγού από την z στην z+1 και στην ουσία ο όγκος ελέγχου P γίνεται ο τελευταίος της γενιάς z τότε η διακριτοποίηση που μόλις κάναμε αλλάζει.

Παραθέτεται το παρακάτω σχήμα 4.7 για διευκόλυνση στην κατανόηση.



Σχήμα 4.7:Παρουσιάζεται η περίπτωση όπου το σημείο P βρίσκεται στην αλλαγή γενιάς κατά την εισπνοή.

Στην προκειμένη περίπτωση και με δεδομένο ότι η λύση μας δεν θα πρέπει να παρουσιάζει ασυνέχειες θα πρέπει να ισχύει το παρακάτω:

$$T_{d} = D_{eff,e}A_{e}\frac{c_{P} - c_{E}}{\Delta x} = D_{eff,P}A_{P}\frac{c_{P} - c_{e}}{\Delta x_{-}} = D_{eff,E}A_{E}\frac{c_{e} - c_{E}}{\Delta x_{+}} (4.24)$$

Όπου με  $T_d$  συμβολίζουμε τη μεταφορά με διάχυση , τα  $\Delta x_-$  και  $\Delta x_+$  είναι οι αποστάσεις των Ε και Ρ αντίστοιχα από το μέτωπο ε και  $\Delta x = \Delta x_- + \Delta x_+$ .

Απαιτούμε δηλαδή, η μεταφορά με διάχυση που θα γίνεται μεταξύ του P και E να είναι η ίδια με αυτή που γίνεται μεταξύ του P και e και ίδια με αυτή που γίνεται μεταξύ του P και e και ίδια με αυτή που γίνεται μεταξύ του e και του E. Στην ουσία πρόκειται για μία συνοριακή συνθήκη η οποία θα μας εξασφαλίσει την συνέχεια της λύσης μας. Λύνοντας την (4.24) ως προς τις διαφορές  $c_P - c_e$  και  $c_e - c_E$  έχουμε:

$$c_P - c_e = \frac{T_d \Delta \mathbf{x}_-}{D_{eff,P} A_P}$$
(4.24*a*)

$$c_e - c_E = \frac{T_d \Delta x_+}{D_{eff,E} A_E} (4.24b)$$

Προσθέτοντας τις (4.24*a*) και (4.24*b*) λαμβάνουμε:

$$c_P - c_E = T_d \left( \frac{\Delta x_-}{D_{eff,P}A_P} + \frac{\Delta x_+}{D_{eff,E}A_E} \right) (4.24c)$$

Ο όρος  $D_{eff,e}A_e$  υπολογίζεται στο πρόσωπο <br/> e του όγκου ελέγχου από την παρακάτω σχέση :

$$\frac{1}{D_{eff,e}A_e} = \frac{f_e}{D_{eff,E}A_E} + \frac{1 - f_e}{D_{eff,P}A_P}$$
(4.25)

όπου

$$f_e = \frac{\Delta x_+}{\Delta x} \tag{4.25a}$$

Συνεχίζοντας την διακριτοποίηση για τον τέταρτο όρο έχουμε :

$$R_4 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[ \left( \frac{Q_{a,z} + QP_{t,z}}{l_z} \right) c \right] dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[ \left( \frac{Q_{a,z} + QP_{t,z}}{l_z} \right) c \right] dx dt$$

$$R_4 = \Delta \mathbf{x} \left[ \int_t^{t+\Delta t} \left[ \left( \frac{Q_{a,z} + \mathbf{Q} \mathbf{P}_{t,z}}{l_z} \right) c \right]_P \mathrm{dt} \right]$$

$$R_{4} = \frac{Q_{a,P,Z}^{n+1} + Q_{P}^{n+1} P_{t,P,Z}^{n+1}}{l_{P,Z}} c_{P}^{n+1} \Delta x \Delta t \quad (4.22d)$$

Και για τον πέμπτο όρο προκύπτει:

$$R_{5} = \int_{W}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} (\frac{b\gamma_{z} V_{a,z}}{l_{z}}) c_{a,z} dt dx$$

$$R_{5} = \frac{b\gamma_{P,Z}^{n+1}V_{a,P,Z}^{n+1}}{l_{P,Z}}c_{a,P}^{n+1}\Delta x\Delta t \ (4.22e)$$

Βλέπουμε και στον  $R_4$  και στον  $R_5$  πως η c βρίσκεται στην καινούργια χρονική στιγμή. Αντικαθιστώντας στην αρχική εξίσωση διατήρησης τους  $R_1, R_2, R_3, R_4$  και  $R_5$  λαμβάνουμε :

$$(c_P^{n+1}A_P^{n+1} - c_P^n A_P^n)\Delta x = \left[-Q_e^{n+1}c_P^{n+1} + Q_w^{n+1}c_W^{n+1}\right]\Delta t +$$

$$+\Delta t \left[ A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_e^{n+1} - c_p^{n+1}}{(\delta x)_e} - A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_p^{n+1} - c_w^{n+1}}{(\delta x)_w} \right] +$$

$$+\frac{Q_{a,P,Z}^{n+1}+Q_P^{n+1}P_{t,P,Z}^{n+1}}{l_{P,Z}}c_P^{n+1}\Delta x\Delta t+\frac{b\gamma_{P,Z}^{n+1}V_{a,P,Z}^{n+1}}{l_{P,Z}}c_{a,P}^{n+1}\Delta x\Delta t \quad (4.26)$$

Εφόσον τα μέτωπα των όγκων ελέγχου βρίσκονται στο μέσον των κόμβων θα αντικαταστήσουμε το Δx στην παραπάνω σχέση ως εξής:

$$\Delta \mathbf{x} = \frac{(\delta \mathbf{x})_w + (\delta \mathbf{x})_e}{2}$$

Έπειτα θα την πολλαπλασιάσουμε με 2/Δt και έτσι η διακριτοποιημένη σχέση διατήρησης θα γίνεται:

$$\begin{split} \left(c_{p}^{n+1}A_{p}^{n+1} - c_{p}^{n}A_{p}^{n}\right) \frac{(\delta x)_{w} + (\delta x)_{e}}{\Delta t} &= 2\left[-Q_{e}^{n+1}c_{p}^{n+1} + Q_{w}^{n+1}c_{w}^{n+1}\right] + \\ &+ 2\left[A_{e}^{n+1}D_{\text{eff},e}^{n+1}\frac{c_{e}^{n+1} - c_{p}^{n+1}}{(\delta x)_{e}} - A_{w}^{n+1}D_{\text{eff},w}^{n+1}\frac{c_{p}^{n+1} - c_{w}^{n+1}}{(\delta x)_{w}}\right] + \\ &\quad \frac{Q_{a,P,z}^{n+1} + Q_{p}^{n+1}P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}}\left((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e}\right)c_{p}^{n+1} + \\ &\quad + \frac{b\gamma_{P,z}^{n+1}V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}}\left((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e}\right)c_{a,p}^{n+1}\left(4.26a\right) \end{split}$$

Για ευκολία θέτουμε τους εξής συντελεστές - πίνακες:

$$L_1 = [A_P^{n+1} \frac{((\delta \mathbf{x})_w + (\delta \mathbf{x})_e)}{\Delta t}]$$

$$L_{1,0} = \left[A_P^n \frac{((\delta \mathbf{x})_w + (\delta \mathbf{x})_e)}{\Delta t}\right]$$

$$L_2 = [2Q_e^{n+1}, 2Q_w^{n+1}]$$

$$L_{3} = \left[\frac{2A_{e}^{n+1}D_{\text{eff},e}^{n+1}}{(\delta x)_{e}}, \frac{2A_{w}^{n+1}D_{\text{eff},w}^{n+1}}{(\delta x)_{w}}\right]$$

$$L_{4} = \left[\frac{Q_{a,P,Z}^{n+1} + Q_{P}^{n+1}P_{t,P,Z}^{n+1}}{l_{P,Z}}((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})\right]$$
$$L_{5} = \left[\frac{b\gamma_{P,Z}^{n+1}V_{a,P,Z}^{n+1}}{l_{P,Z}}((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})\right]$$

Η τελική διακριτοποιημένη εξίσωση διατήρησης γράφεται ως:

$$(L_{1}c_{P}^{n+1} - L_{1,0}c_{P}^{n}) = -L_{2,1}c_{P}^{n+1} + L_{2,2}c_{W}^{n+1} + L_{3,1}(c_{E}^{n+1} - c_{P}^{n+1}) - L_{3,2}(c_{P}^{n+1} - c_{W}^{n+1}) + L_{4}c_{P}^{n+1} + L_{5}c_{a,p}^{n+1}$$

$$(-L_{2,2} - L_{3,2}) c_{W}^{n+1} + (L_{1} + L_{2,1} + L_{3,1} + L_{3,2} + L_{4}) c_{P}^{n+1} - L_{3,1}c_{E}^{n+1} - L_{5}c_{a,p}^{n+1} = L_{1,0}c_{P}^{n} (4.26b)$$

Γενικεύοντας για κάθε οποιαδήποτε τριάδα χωρικών κόμβων έχουμε:

$$(-L_{2,2} - L_{3,2}) c_{i-1}^{n+1} + (L_1 + L_{2,1} + L_{3,1} + L_{3,2} + L_4) c_i^{n+1} - L_{3,1} c_{i+1}^{n+1} - L_5 c_{a,p}^{n+1} = L_{1,0} c_i^n$$

$$(4.26c)$$

Θα πρέπει τώρα να γράψουμε τις αρχικές και τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος.

Ξεκινώντας λοιπόν από τις αρχικές συνθήκες έχουμε ότι t=0 και για όλα τα x η συγκέντρωση του αερολύματος είναι μηδέν. Δηλαδή δεν υπάρχει πουθενά στον πνεύμονα και στα υπόλοιπα μέρη του αναπνευστικού μάζα αερολύματος. Γράφουμε λοιπόν : c(x, t = 0), τότε  $c_i(n = 0) = c_i^0 = 0$ 

Συνεχίζοντας με τις συνοριακές έχουμε ότι :

 Στον μηδενικό κόμβο ,δηλαδή στην είσοδο της τραχείας (x=0) η συγκέντρωση είναι ίση με 1 και έτσι γράφουμε:

$$c(x = 0, t) = 1$$
, τότε  $c_0^n = 0$  για κάθε τιμή του n

2) Στον τελευταίο κόμβο, έστω ότι τον λέμε N ,στο τέλος δηλαδή του αγωγού της 23<sup>ης</sup> γενιάς (x=L) η ροή μάζας είναι μηδενική. Αυτό είναι εύκολα κατανοητό διότι αν σκεφτούμε ότι εκεί υπάρχει τοίχωμα κάθετο στη ροή, αντιλαμβανόμαστε ότι η ταχύτητα εκεί μηδενίζεται και επομένως και η ογκομετρική παροχή. Έτσι, η μεταφορά μέσω συναγωγής είναι και αυτή μηδενική. Επίσης, αν αγνοήσουμε τυχόν επικαθήσεις στο τοίχωμα ,κάτι που είναι εφικτό γιατί είναι αρκετά μικρές, τότε η μεταφορά μέσω διάχυσης είναι και αυτή μηδενική.

Έχουμε λοιπόν ότι:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x=L} = 0$$

Για να διακριτοποιήσουμε αυτήν την παράγωγο θα χρησιμοποιήσουμε ένα σχήμα ανάντη διαφορών λίγο πιο σύνθετο από τα προηγούμενα, τα οποία ήταν απλά σχήματα ανάντη διαφορών. Αν και λόγω της φύσης της διάχυσης για τη διακριτοποίηση χρησιμοποιούμε πάντα σχήμα κεντρικών διαφορών στην προκειμένη περίπτωση θα χρησιμοποιηθεί σχήμα ανάντη, διότι όπως είναι εμφανές η διάχυση στον τελευταίο κόμβο μπορεί να γίνει μόνο προς μία κατεύθυνση την κατεύθυνση που είναι αντίθετη στη ροή. Επίσης, θα ήταν εντελώς άτοπο να θεωρηθεί φανταστικός κόμβος πέραν του τελευταίου, ώστε να γίνει προσπάθεια προσέγγισης της παραγώγου με σχήμα κεντρικών διαφορών.

Όποτε έχουμε:

$$(\frac{\partial c}{\partial x})_{x=L} = 0$$

$$\frac{3c_{\rm N} - 4c_{\rm N-1} + c_{\rm N-2}}{2\Delta x} = 0$$

$$3c_{\rm N} - 4c_{\rm N-1} + c_{\rm N-2} = 0 \quad (4.27)$$

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω συνοριακές μαζί με τις διακριτοποιήμενες εξισώσεις που προέκυψαν από την εξίσωση διατήρησης προκύπτει ένα καλά ορισμένο πρόβλημα όπου οι εξισώσεις είναι ίσες σε αριθμό με τους αγνώστους. Επομένως, είναι εφικτή η αριθμητική του επίλυση.

# 4.6 Διακριτοποίηση εξισώσεων για την εισπνοή στις κυψελίδες

Γράφουμε ξανά την εξίσωση διατήρησης αερολύματος στις κυψελίδες:

$$\frac{\partial}{\partial t}(V_{a,z}c_{a,z}) = \left(\frac{f_z Q P_{t,z}}{l_z} + \frac{Q_{a,z}}{l_z}\right) \Delta x_z c - \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \quad (4.28)$$

Θα τη διακριτοποιήσουμε όμοια με την εξίσωση διατήρησης στους αεραγωγούς χρησιμοποιώντας πάλι τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου. Έτσι, ολοκληρώνουμε την (4.28) όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z}c_{a,z}) dt dx$$
$$= \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \left( \frac{f_{z}QP_{t,z}}{l_{z}} + \frac{Q_{a,z}}{l_{z}} \right) \Delta x_{z}c - \gamma_{z}V_{a,z}c_{a,z} \right] dt dx (4.28a)$$

Κατά τα γνωστά υπολογίζουμε τους όρους της παραπάνω εξίσωσης ξεχωριστά. Ξεκινάμε με τον πρώτο όρο και έχουμε:

$$K_1 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) dt dx = \int_w^e V_{a,p}^{n+1} (c_{a,p}^{n+1} - c_{a,p}^n) dx$$

$$K_{1} = V_{a,p}^{n+1} (c_{a,p}^{n+1} - c_{a,p}^{n}) \Delta x \quad (4.28b)$$

Εν συνέχεια για τον δεύτερο όρο ισχύει :

$$K_{2} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \left( \frac{f_{z} Q P_{t,z}}{l_{z}} + \frac{Q_{a,z}}{l_{z}} \right) c \right] \Delta x_{z} dt dx$$
$$K_{2} = \frac{f_{z}^{n+1} Q_{P}^{n+1} P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} + \frac{Q_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta x_{z} \Delta x \Delta t c_{P}^{n+1} (4.28c)$$

Και τέλος για τον τρίτο όρο ισχύει :

$$K_3 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} [\gamma_z V_{a,z} c_{a,z}] dt dx$$

$$K_{3} = \gamma_{P}^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t \quad (4.28d)$$

Εισάγουμε τους όρους  $K_1, K_2$  και  $K_3$  στην εξίσωση διατήρησης (4.28*a*) και έχουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$V_{a,p}^{n+1} (c_{a,p}^{n+1} - c_{a,p}^{n}) \Delta x = \frac{f_z^{n+1} Q_p^{n+1} P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} + \frac{Q_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta x_z \Delta x \Delta t c_P^{n+1} + \gamma_P^{n+1} V_{a,p}^{n+1} c_{a,p}^{n+1} \Delta x \Delta t$$

$$c_{a,P}^{n+1} \left( \frac{V_{a,P}^{n+1}}{\Delta t} + \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} \right) - \left( \frac{f_z^{n+1} Q_P^{n+1} P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} + \frac{Q_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} \right) \Delta x_z c_P^{n+1}$$

$$=$$

$$= \frac{V_{a,P}^{n+1}}{\Delta t} c_{a,P}^{n} \quad (4.29)$$

Επίσης παρατηρούμε και εδώ πως πρόκειται για ένα πλήρως άρρητο σχήμα.

## 4.7 Εκπνοή

Κατά τη διαδικασία της εκπνοής η ροή πηγαίνει αντίθετα, δηλαδή από τις κυψελίδες στους αεραγωγούς και προς την αρνητική κατεύθυνση του x. Επομένως, είναι εύληπτο ότι τα πρόσημα των ογκομετρικών παροχών (Q, Q<sub>a,z</sub>) αλλάζουν και γίνονται αρνητικά. Παραθέτουμε το αντίστοιχο σχήμα για την εκπνοή για διευκόλυνση στην κατανόηση.



Σχήμα 4.8:Παρουσίαση του πεπερασμένου όγκου ελέγχου σε μορφή δακτυλίων κατά τη διαδικασία της εκπνοής, για τα σημέια W,P,E.

Όσον αφορά την εκροή από την παράπλευρη επιφάνεια προς τον αεραγωγό (δηλαδή εισροή προς τον αεραγωγό), ο όρος μεταφοράς για ένα διαφορικό μήκος dx ισούται με:

$$dG_{ex} = -\frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_z}dx + P_{t,z}\frac{|Q(x)|c(x)}{l_z}dx$$
(4.30)

Ο πρώτος όρος  $\left(-\frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_z}dx\right)$  έχει πλέον αντίθετο πρόσημο στην εκπνοή.



Σχήμα 4.9:Παρουσίαση της εγκάρσιας τομής του όγκου ελέγχου κατά τη διαδικασία της εκπνοής που έχει τη μορφή δακτυλίου, ο οποίος φέρει στη περίμετρο του τις κυψελίδες που θεωρούμε ότι είναι σφαιρικού σχήματος.

Είναι προφανές πως το χωρικό πλέγμα μας είναι το ίδιο με την εισπνοή αλλά οι διακριτοποιημένες εξισώσεις και εν μέρει οι συνοριακές μας συνθήκες αλλάζουν. Παρακάτω θα παρουσιασθεί η διαδικασία διακρητοποίησης για την εκπνοή στους αεραγωγούς και έπειτα στις κυψελίδες.

# 4.7.1 Διακριτοποίηση εξισώσεων στους αεραγωγούς για την εκπνοή

Γράφουμε την εξίσωση διατήρησης για τους αεραγωγούς κατά την εκπνοή:

$$\frac{\partial}{\partial t}(cA) = -\frac{\partial}{\partial x}(cQ) + \frac{\partial}{\partial x}\left(AD_{eff}\frac{\partial c}{\partial x}\right) + \frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_z} - \left(\frac{|Q|P_{t,z}}{l_z}\right)c + \left(\frac{b\gamma_z V_{a,z}}{l_z}\right)c_{a,z} \quad (4.31)$$

Ολοκληρώνοντας λαμβάνουμε:

$$\int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (cA) dt dx = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ -\frac{\partial}{\partial x} (cQ) + \frac{\partial}{\partial x} (AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x}) + \frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_{z}} - \left(\frac{|Q|P_{t,z}}{l_{z}}\right)c + \left(\frac{b\gamma_{z}V_{a,z}}{l_{z}}\right)c_{a,z}\right] dt dx \qquad (4.31a)$$

Εν συνέχεια θα υπολογίσουμε εκ νέου τους όρους της ξεχωριστά.

Γράφουμε τον πρώτο όρο:

$$R'_{1} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (cA) dt dx = \int_{w}^{e} (A^{n+1}c^{n+1} - A^{n}c^{n}) dx$$
$$R'_{1} = (A_{p}^{n+1}c_{p}^{n+1} - A_{p}^{n}c_{p}^{n})\Delta x \quad (4.31b)$$

Αντίστοιχα για τον δεύτερο γράφουμε:

$$R'_{2} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} -\frac{\partial}{\partial x} (cQ) dt dx = -\int_{t}^{t+\Delta t} \int_{w}^{e} \frac{\partial}{\partial x} (cQ) dx dt$$
$$R'_{2} = -\int_{t}^{t+\Delta t} [(cQ)_{e} - (cQ)_{w}] dt = \left(-Q_{e}^{n+1}c_{E}^{n+1} + Q_{w}^{n+1}c_{P}^{n+1}\right) \Delta t \quad (4.31c)$$

Όπου και εδώ για τον όρο συναγωγής χρησιμοποιήθηκε το ανάντη σχήμα upwind αυτή τη φορά όμως για  $F_e < 0$ , λόγω ότι έχουμε αντίθετη κατεύθυνση ταχύτητας από πριν.

Για τον τρίτο όρο:

$$R'_{3} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} (AD_{eff} \frac{\partial c}{\partial x}) dt dx = \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{w}^{e} \frac{\partial}{\partial x} (AD_{eff} \frac{\partial c}{\partial x}) dx dt$$

$$R'_{3} = \int_{t}^{t+\Delta t} [(AD_{eff} \frac{\partial c}{\partial x})_{e} - (AD_{eff} \frac{\partial c}{\partial x})_{w}] dt$$

$$R'_{3} = A_{e}^{n+1} D_{eff,e}^{n+1} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{c_{E} - c_{P}}{(\delta x)_{e}} dt - A_{w}^{n+1} D_{eff,w}^{n+1} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{c_{P} - c_{W}}{(\delta x)_{w}} dt$$

$$R'_{3} = \left[A_{e}^{n+1} D_{eff,e}^{n+1} \frac{c_{E}^{n+1} - c_{P}^{n+1}}{(\delta x)_{e}} - A_{w}^{n+1} D_{eff,w}^{n+1} \frac{c_{P}^{n+1} - c_{W}^{n+1}}{(\delta x)_{w}}\right] \Delta t \quad (4.31d)$$

Παρακάτω θα δούμε τη διαφοροποίηση που γίνεται στον τρίτο όρο όταν όγκος ελέγχου P ανήκει στην z+1 γενιά και ο διπλανός του Ε βρίσκεται στην z γενιά.



Σχήμα 4.10:Παρουσιάζεται η περίπτωση όπου το σημείο Ρ βρίσκεται στην αλλαγή γενιάς κατά την εκπνοή.

Όμοια με την εισπνοή για λόγους συνέχειας απαιτούμε:

$$N_{d} = D_{eff,e}A_{e}\frac{c_{P} - c_{E}}{\Delta x} = D_{eff,P}A_{P}\frac{c_{P} - c_{e}}{\Delta x_{-}} = D_{eff,E}A_{E}\frac{c_{e} - c_{E}}{\Delta x_{+}}$$
(4.32)

Λύνουμε τις παραπάνω ισότητες ως προς τις διαφορές  $c_P - c_e$  και  $c_e - c_E$  και γράφουμε:

$$c_P - c_e = \frac{T_d \Delta x_-}{D_{eff,P} A_P} \qquad (4.32a)$$

$$c_e - c_E = \frac{T_d \Delta x_+}{D_{eff,E} A_E}$$
(4.32b)

Προσθέτοντας τις δύο παραπάνω:

$$c_P - c_e + c_e - c_E = c_P - c_E = T_d \left( \frac{\Delta x_-}{D_{eff,P}A_P} + \frac{\Delta x_+}{D_{eff,E}A_E} \right)$$
$$c_P - c_E = T_d \left( \frac{\Delta x_-}{D_{eff,P}A_P} + \frac{\Delta x_+}{D_{eff,E}A_E} \right)$$
(4.32c)

Όμοια ο όρος  $D_{eff,e}A_e$  θα υπολογιστεί στο πρόσωπο ε του όγκου ελέγχου με βάση τη παρακάτω σχέση:

$$\frac{1}{D_{eff,e}A_e} = \frac{f_e}{D_{eff,E}A_E} + \frac{1 - f_e}{D_{eff,P}A_P} (4.33a)$$
$$\mu\epsilon f_e = \frac{\Delta x_+}{\Delta x} (4.33b)$$

Ο τέταρτος όρος γράφεται ως:

$$R'_{4} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_{z}} - \left(\frac{|Q|P_{t,z}}{l_{z}}\right)c \right] dt \, dx$$
$$= \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{w}^{e} \left[ \frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_{z}} - \left(\frac{|Q|P_{t,z}}{l_{z}}\right)c \right] dx \, dt$$
$$R'_{4} = \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \left(\frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_{z}} - \frac{|Q_{P}|P_{t,z}}{l_{z}}c_{P}\right)\Delta x \right] dt \, (4.31e)$$

Και ο πέμπτος όρος:

$$R'_{5} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} (\frac{b\gamma_{z}V_{a,z}}{l_{z}}) c_{a,z} dt dx = \frac{b\gamma_{P,z}^{n+1}V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t \quad (4.31f)$$

Αντικαθιστώντας τους  $R'_1$ ,  $R'_2$ ,  $R'_3$ ,  $R'_4$  και  $R'_5$  στην εξίσωση διατήρησης μάζας για την εκπνοή στους αεραγωγούς αυτή λαμβάνει τη διακριτοποιημένη της μορφή που φαίνεται παρακάτω:

$$(A_{P}^{n+1}c_{P}^{n+1} - A_{P}^{n}c_{P}^{n})\Delta x = (-Q_{e}^{n+1}c_{E}^{n+1} + Q_{w}^{n+1}c_{P}^{n+1})\Delta t + + \left[A_{e}^{n+1}D_{\text{eff},e}^{n+1}\frac{c_{E}^{n+1} - c_{P}^{n+1}}{(\delta x)_{e}} - A_{w}^{n+1}D_{\text{eff},w}^{n+1}\frac{c_{P}^{n+1} - c_{W}^{n+1}}{(\delta x)_{w}}\right]\Delta t + + \left(\frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}}c_{a,z}^{n+1} - \frac{|Q_{P}|^{n+1}P_{t,P,z}}{l_{P,z}}c_{P}^{n+1})\Delta x\Delta t \right. + \frac{b\gamma_{P,z}^{n+1}V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}}\Delta x\Delta t c_{a,P}^{n+1} (4.34)$$

Αντίστοιχα με την εισπνοή, αντικαθιστού<br/>με το Δx ως:

$$\Delta \mathbf{x} = \frac{(\delta \mathbf{x})_w + (\delta \mathbf{x})_e}{2}$$

και πολλαπλασιάζουμε κάθε όρο με  $\frac{2}{\Delta t}$ , οπότε λαμβάνουμε την εξής μορφή της εξίσωσης διατήρησης :

$$(A_{P}^{n+1}c_{P}^{n+1} - A_{P}^{n}c_{P}^{n})\frac{(\delta x)_{w} + (\delta x)_{e}}{\Delta t} = 2(-Q_{e}^{n+1}c_{E}^{n+1} + Q_{w}^{n+1}c_{P}^{n+1}) + 2\left[A_{e}^{n+1}D_{\text{eff},e}^{n+1}\frac{c_{E}^{n+1} - c_{P}^{n+1}}{(\delta x)_{e}} - A_{w}^{n+1}D_{\text{eff},w}^{n+1}\frac{c_{P}^{n+1} - c_{W}^{n+1}}{(\delta x)_{w}}\right] + \frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}}((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})c_{a,P}^{n+1} - \frac{|Q_{P}|^{n+1}P_{t,P,z}}{l_{P,z}}((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})c_{P}^{n+1} + \frac{b\gamma_{P,z}^{n+1}V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}}((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})c_{a,P}^{n+1} - \frac{(A_{e}^{n+1})^{n+1}}{(\delta x)_{e}^{n+1}} + \frac{b\gamma_{P,z}^{n+1}V_{a,P,z}^{n+1}}{(\delta x)_{e}^{n+1}} + (A_{e}^{n+1})^{n+1} + ($$

Εν συνέχεια θέτουμε τους παρακάτω συντελεστές-πίνακες :

$$L_{1} = [A_{P}^{n+1} \frac{((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})}{\Delta t}]$$

$$L_{1,0} = [A_{P}^{n} \frac{((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})}{\Delta t}]$$

$$L_{2} = [2Q_{e}^{n+1}, 2Q_{w}^{n+1}]$$

$$L_{3} = [\frac{2A_{e}^{n+1}D_{\text{eff},e}^{n+1}}{(\delta x_{e})}, \frac{2A_{w}^{n+1}D_{\text{eff},w}^{n+1}}{(\delta x)_{w}}]$$

$$L_{4} = [\frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}}((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})]$$

$$L_{5} = [\frac{|Q_{P}|^{n+1}P_{t,P,z}}{l_{P,z}}((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})]$$

$$L_{6} = [(\frac{b\gamma_{z}^{n+1}V_{a,z}^{n+1}}{l_{z}})_{P}((\delta x)_{w} + (\delta x)_{e})]$$

Ξαναγράφουμε την εξίσωση με τους συντελεστές- πίνακες όπως φαίνεται παρακάτω:

$$L_{1}c_{P}^{n+1} - L_{1,0}c_{P}^{n} = -L_{2,1}c_{E}^{n+1} + L_{2,2}c_{P}^{n+1} + L_{3,1}c_{E}^{n+1} - (L_{3,1} + L_{3,2})c_{P}^{n+1} + L_{3,2}c_{W}^{n+1} + L_{4}c_{a,P}^{n+1} - L_{5}c_{P}^{n+1} + L_{6}c_{a,P}^{n+1}$$
(4.34b)

Βγάζουμε ως κοινούς παράγοντες τις μεταβλητές των συγκεντρώσεων και η διακριτοποιημένη εξίσωση διατήρησης γράφεται τελικά ως:

$$-L_{3,2}c_W^{n+1} + (L_1 - L_{2,2} + L_{3,1} + L_{3,2} + L_5)c_P^{n+1} + (L_{2,1} - L_{3,1})c_E^{n+1} + (L_5 + L_6)c_{a,P}^{n+1} = L_{1,0}c_P^n \quad (4.34c)$$

Γενικεύοντας για οποιοδήποτε τριάδα κόμβων αντικαθιστούμε τα  $(W \to i - 1, P \to i, E \to i + 1)$  και έχουμε :

$$-L_{3,2}c_{i-1}^{n+1} + (L_1 - L_{2,2} + L_{3,1} + L_{3,2} + L_5)c_i^{n+1} + (L_{2,1} - L_{3,1})c_{i+1}^{n+1} + (L_5 + L_6)c_{a,i}^{n+1} = L_{1,0}c_i^n$$
(4.34d)

Μένει τώρα να γράψουμε τις αντίστοιχες συνοριακές και αρχικές συνθήκες.

Γράφοντας πρώτα τις αρχικές συνθήκες του προβλήματος, θεωρούμε ότι γνωρίζουμε τις τιμές της συγκέντρωσης σε κάθε ενδιάμεσο χωρικό κόμβο στο τέλος της εισπνοής, εφόσον αυτές έχουν ήδη υπολογιστεί με την επίλυση του προβλήματος της εισπνοής.

Έτσι γράφουμε ότι  $c(x, t = T_{inh})$ , τότε  $c_i(n = M) = c_i^M = \gamma v ω \sigma \tau \eta$  τιμή.

Συνεχίζοντας γράφουμε τις συνοριακές συνθήκες και έχουμε:

 Για τον μηδενικό κόμβο θεωρούμε ότι συνολική ροή μάζας στη x-κατεύθυνση είναι μηδενική και έτσι γράφουμε:

$$(\frac{\partial c}{\partial x})_{x=0} = 0$$

Για την προσέγγιση αυτής της παραγώγου θα χρησιμοποιήσουμε σχήμα κατάντη διαφορών όσον αφορά την κατεύθυνση της ροής ,όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\frac{-3c_0 + 4c_1 - c_2}{2\Delta x} = 0$$
$$-3c_0 + 4c_1 - c_2 = 0 \quad (4.35)$$

Αυτό είναι ένα πιο σύνθετο σχήμα κατάντη διαφορών θα μπορούσε να είχε χρησιμοποιηθεί ένα πιο απλό όπως:

$$\frac{c_0 - c_1}{\Delta x} = 0$$

Με τη διαφορά ότι για το ίδιο Δx το σχήμα αυτό θα έχει υποδιπλάσια ακρίβεια από το σύνθετο.

2) Για τον τελευταίο κόμβο ,έστω ότι τον λέμε Ν, ισχύει η ίδια συνοριακή όπως προηγουμένως με την εισπνοή. Δηλαδή, η ροή μάζας είναι μηδενική. Η ταχύτητα και η ογκομετρική παροχή μηδενίζεται. Η ροή με διάχυση είναι σχεδόν μηδαμινή οπότε η πρώτη παράγωγος της συγκέντρωσης μηδενίζεται και αυτή (Σ.Σ. Neuman). Έτσι γράφουμε:

$$(\frac{\partial c}{\partial x})_{x=L} = 0$$

Και την προσεγγίζουμε ως εξής:

$$\frac{3c_{\rm N} - 4c_{\rm N-1} + c_{\rm N-2}}{2\Delta x} = 0$$

$$3c_{\rm N} - 4c_{\rm N-1} + c_{\rm N-2} = 0 \quad (4.36)$$

Με την εισαγωγή των συνοριακών συνθηκών προκύπτει ένα καλά ορισμένο πρόβλημα με ίδιο αριθμό εξισώσεων και αγνώστων που είναι δυνατό να επιλυθεί.

# 4.7.2 Διακριτοποίηση εξισώσεων στις κυψελίδες για την εκπνοή

Γράφουμε πάλι την εξίσωση διατήρησης μάζας για τις κυψελίδες σε όγκο ελέγχου CV:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} c \, dV = [εισροή] - [εκροή] (4.37)$$

Όπου:

$$[εισροή] = f_z \frac{P_{t,z}}{l_z} |Q| c \Delta x_z \quad (4.37a)$$

και

$$[\varepsilon \kappa \rho \circ \dot{\eta}] = \frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_z} \Delta \mathbf{x}_z + \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \quad (4.37b)$$

Να θυμηθούμε εδώ ότι ο όρος της εισροής είναι ίσος με τη ροή μάζας αερολύματος που προσκρούει στα τοιχώματα του αεραγωγού και εισέρχεται στις κυψελίδες. Ενώ, ο όρος της εκροής είναι ίσος με τη ροή μάζας αερολύματος από τις κυψελίδες προς τον αεραγωγό καθώς και με το ρυθμό που εναποτίθενται τα σωματίδια στα τοιχώματα των κυψελίδων.

Γράφοντας ξανά το ισοζύγιο αναλυτικότερα λαμβάνουμε:

$$\frac{\partial}{\partial t}(V_{a,z}c_{a,z}) = f_z \frac{P_{t,z}}{l_z} |Q| c \Delta \mathbf{x}_z - \frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_z} \Delta \mathbf{x}_z - \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \qquad (4.37c)$$

Ολοκληρώνουμε την παραπάνω εξίσωση ώστε να προχωρήσουμε στη διακριτοποίηση και έχουμε:

$$\int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) \, dt \, dx =$$

$$= \int_{W}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ f_{z} \frac{P_{t,z}}{l_{z}} |Q| c\Delta x_{z} - \frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_{z}} \Delta x_{z} - \gamma_{z} V_{a,z} c_{a,z} \right] dt \, dx \quad (4.37d)$$

Κατά τα γνωστά θα υπολογίσουμε κάθε όρο ξεχωριστά:

Γράφουμε τον πρώτο όρο:

$$K'_{1} = \int_{W}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) dt dx = \left( V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} - V_{a,P}^{n} c_{a,P}^{n} \right) \Delta x \quad (4.37e)$$

Τον δεύτερο:

$$K'_{2} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} f_{z} \frac{P_{t,z}}{l_{z}} |Q| c \Delta x_{z} dt dx = \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \left( f_{z} \frac{P_{t,z}}{l_{z}} |Q| \Delta x_{z} \right)_{p} \Delta x c_{p} \right] dt$$
$$K'_{2} = \left( f_{z} \frac{P_{t,p,z}}{l_{p,z}} |Q_{p}|^{n+1} \right) \Delta x_{z} c_{p}^{n+1} \Delta x \Delta t \qquad (4.37f)$$

Και εν συνέχεια τον τρίτο και τέταρτο όρο:

$$K'_{3} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_{z}} \Delta x_{z} \, dt \, dx = \int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \left( \frac{|Q_{a,z}|}{l_{z}} \Delta x_{z} \right)_{P} \Delta x c_{a,P} \right] dt$$
$$K'_{3} = \frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta x_{z} c_{a,P} \Delta x \Delta t \qquad (4.37g)$$

$$K'_{4} = \int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} (\gamma_{z} V_{a,z} c_{a,z}) dt dx = \int_{t}^{t+\Delta t} [(\gamma_{z} V_{a,z} c_{a,z})_{P} \Delta x] dt$$
$$K'_{4} = \gamma_{P}^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t \qquad (4.37h)$$
Αντικαθιστώντας τους  $K'_1K'_2K'_3$  και  $K'_4$  στην αρχική εξίσωση διατήρησης (4.37d) λαμβάνουμε:

$$\left( V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} - V_{a,P}^{n} c_{a,P}^{n} \right) \Delta \mathbf{x} = \left( f_{z} \frac{P_{t,P,z}}{l_{P,z}} |Q_{P}|^{n+1} \Delta \mathbf{x}_{z} \right) c_{P}^{n+1} \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{t} + - \left( \frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta \mathbf{x}_{z} \right) c_{a,P}^{n+1} \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{t} - \gamma_{P}^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{t}$$
(4.38)

Πολλαπλασιάζοντας και τα δύο μέλη με $\frac{1}{\Delta x \Delta t}$ προκύπτει :

$$\left( V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} - V_{a,P}^{n} c_{a,P}^{n} \right) \frac{1}{\Delta t} = \left( f_z \frac{P_{t,P,z}}{l_{P,z}} |Q_P|^{n+1} \Delta \mathbf{x}_z \right) c_P^{n+1} + \\ - \left( \frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta \mathbf{x}_z \right) c_{a,P}^{n+1} - \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1}$$
(4.38*a*)

Παραγοντοποιούμε και λαμβάνουμε:

$$-\left(f_{z}P_{t,z}\left|Q\right|^{n+1}\frac{\Delta x_{z}}{l_{z}}\right)_{p}c_{p}^{n+1}+\left[1+\left(\frac{|Q_{a,z}|^{n+1}}{V_{a,p}^{n+1}}\frac{\Delta x_{z}}{l_{z}}\right)_{p}\Delta t+\gamma_{p}^{n+1}\Delta t\right]V_{a,p}^{n+1}c_{a,p}^{n+1}$$
$$=V_{a,p}^{n}c_{a,p}^{n}\qquad(4.38b)$$

# Κεφάλαιο 5. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ-ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Ένα από τα βασικότερα ερωτήματα μετά την παραπάνω ανάλυση είναι τι πραγματικά συμβαίνει σε πρακτικό και πραγματικό επίπεδο στον ανθρώπινο πνεύμονα και πως αυτός επηρεάζεται από εξωτερικούς παράγοντες, συγκεκριμένα πως τον επηρεάζει η κίνηση των σωματιδίων της ατμόσφαιρας και πόσο αποτελεσματικές είναι οι φαρμακευτικές αγωγές. Το τι συμβαίνει πραγματικά είναι παρά πολύ δύσκολο να αναλυθεί και να υπολογιστεί με πλήρη ακρίβεια, εξαιτίας της πολυπλοκότητας της δομής και της λειτουργίας του πνεύμονα, καθώς επίσης και συμπεράσματα αφορούν κάποιες εκτιμήσεις, οι οποίες προσεγγίζουν και αντικατοπτρίζουν την πραγματική λύση του προβλήματος με μεγάλη ακρίβεια.

Στο τελευταίο αυτό κεφάλαιο θα παρουσιαστούν και θα αναλυθούν αποτελέσματα ερευνών που έχουν πραγματοποιηθεί μέσω μετρήσεων και παρατηρήσεων, τα οποία αφορούν κυρίως την εναπόθεση των σωματιδίων στον πνεύμονα και πόσο βαθιά αυτά εισχωρούν και επηρεάζουν την λειτουργία αυτού.

## Μέγεθος σωματιδίου και θνησιμότητα

Η έκθεση του ανθρώπου σε ατμοσφαιρικό αέρα εμπλουτισμένο με επιβλαβή σωματίδια αυξάνει τον κίνδυνο εμφάνισης καρδιαγγειακών και αναπνευστικών προβλημάτων. Συγκεκριμένα, η μακροχρόνια έκθεση σε σωματίδια με αεροδυναμική διάμετρο μικρότερης των 2,5 μm (PM<sub>2.5</sub>) έχει αποδειχτεί ότι έχει άμεση σύνδεση με την εμφάνιση των παραπάνω προβλημάτων και την μεγαλύτερη θνησιμότητα σε σχέση με σωματίδια μεγαλύτερης διαμέτρου (Dockery et al., 1993; Krewski et al., 2009; Pope et al., 2002; Pope & Dockery, 2006).

Έρευνες έχουν δείξει ότι η κατανομή του μεγέθους των σωματιδίων της ατμόσφαιρας εξαρτάται από γεωγραφικούς παράγοντες, δηλαδή την περιοχή στην οποία γίνονται μετρήσεις, την εκπομπή ρύπων από βιομηχανίες και μέσα μαζικής μεταφοράς, καθώς και τον πληθυσμό της περιοχής, διότι όσο αυξάνεται ο πληθυσμός τόσο αυξάνονται και οι ανάγκες για περισσότερες μετακινήσεις και μεγαλύτερη κατανάλωση ενέργειας.

Παρ 'όλα αυτά, όπως έχει ήδη αναφερθεί μας ενδιαφέρει η διττή αξία των σωματιδίων, δηλαδή δεν μελετάμε μόνο την επίδραση των βλαβερών σωματιδίων της

ατμόσφαιρας, αλλά και τα ωφέλιμα σωματίδια που περιέχονται σε μορφή αερολύματος σε φάρμακα που χρησιμοποιούνται για θεραπευτικούς σκοπούς.

# Εναπόθεση σωματιδίων

Η εναπόθεση των σωματιδίων, καθώς και οι μηχανισμοί με τους οποίες αυτή επιτυγχάνεται έχουν ήδη αναφερθεί και είναι η διάχυση Brown, η βαρυτική καθίζηση και η αδρανειακή πρόσκρουση. Ανάλογα με το μέγεθος του σωματιδίου επιδρά σε αυτό και διαφορετικός μηχανισμός.

Αυτό που μας ενδιαφέρει περισσότερο είναι το πως πραγματικά συμβαίνει επικάθιση των σωματιδίων στα διάφορα σημεία του αναπνευστικού συστήματος. Η μελέτη των μηχανισμών εναπόθεσης στις διάφορες περιοχές του πνεύμονα αποτελεί μια περίπλοκη και δύσκολη διαδικασία. Το κλάσμα της εναπόθεσης των σωματιδίων εξαρτάται τόσο από το μέγεθος, το σχήμα, την πυκνότητα τους, όσο και από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του πνεύμονα και τον τρόπο αναπνοής, που έχει άμεση σχέση με την ροή του αέρα, τον χρόνο εισπνοής και εκπνοής.

Παρακάτω παρατίθεται το διάγραμμα στο σχήμα 5.1, το οποίο βασίζεται στο μοντέλο μελέτης της ICRP (International Commission on Radiological Protection) και μας δείχνει μια απεικόνιση του κλάσματος εναπόθεσης με το μέγεθος του σωματιδίου. Στο συγκεκριμένο διάγραμμα δίνονται πληροφορίες για το κλάσμα εναπόθεσης σωματιδίων στο κεφάλι και την μύτη, στην τραχειοβρογχική περιοχή, τις κυψελίδες, καθώς και την συνολική εναπόθεση στο σύστημα. Είναι εμφανές ότι για μικρότερες διαμέτρους σωματιδίων η εναπόθεση είναι μεγαλύτερη.



Σχήμα 5.1: Απεικόνιση του κλάσματος εναπόθεσης με το μέγεθος του σωματιδίου ICRP (International Commission on Radiological Protection)

## 5.1 Σύνοψη-Μελλοντικοί στόχοι

Στην παρούσα διπλωματική εργασία μελετήθηκε η δομή του αναπνευστικού συστήματος και περιγράφηκε από το μονοδιάστατο μοντέλο του Weibel, ως προς ένα ακίνητο σύστημα αναφοράς (Eulerian model). Αναλύθηκε η ροή του αέρα στους αεραγωγούς και τις κυψελίδες, καθώς επίσης η τροχιά και η εναπόθεση των σωματιδίων στον αναπνευστικό σύστημα. Στη συνέχεια, έγινε εκτενή αναφορά στην μεταφορά μάζας του αερολύματος, καθώς και στις συγκεντρώσεις του αερολύματος στον πνεύμονα. Τα φαινόμενα μεταφοράς μάζας περιγράφηκαν από ισοζύγια όγκων ελέγχου, καταλήγοντας σε διακριτοποιημένες αλγεβρικές εξισώσεις μέσα από την αριθμητική ανάλυση των όγκων αυτών. Τέλος, δόθηκε μια σύντομη ανάλυση μιας βιβλιογραφικής έρευνας για το κλάσμα εναπόθεσης των σωματιδίων στα διάφορα σημεία του πνεύμονα.

Οι μελλοντικοί στόχοι είναι μια εκτενέστερη μελέτη του φαινομένου της αναπνοής και της δομής του αναπνευστικού συστήματος, καθώς επίσης και της εναπόθεσης των σωματιδίων στα διάφορα σημεία του πνεύμονα μεταβάλλοντας κάθε φορά τις παραμέτρους που την επηρεάζουν.

#### Βιβλιογραφία

- Heyder J: Deposition of Inhaled Particles in the Human Respiratory Tract and Consequences for Regional Targeting in Respiratory Drug Delivery. *Proc Am Thorac Soc* 2004; 1 (4): 315–20.
- [2] Weibel, E., Sapoval, B., & Filoche, M. Design of peripheral airways for efficient gas exchange. *Respiratory physiology & neurobiology*, 2005; 148(1): 3-21.
- [3] Weibel, E. Morphometry of the Human Lung. Berlin, Heidelberg: Springer, 1963
- [4] Finlay WH. The Mechanics of Inhaled Pharmaceutical Aerosols an Introduction. Academic Press, San Diego, CA, 2001.
- [5] Choi J-I, Kim CS: Mathematical Analysis of Particle Deposition in Human Lungs: An Improved Single Path Transport Model. *Inhal Toxicol* 2007; 19: 925–939.
- [6] Tsuda A, Henry FS, Butler JP. Chaotic Mixing of Alveolated Duct Flow in Rhythmically Expanding Pulmonary Acinus *J Appl Physiol* 1995; 79(3): 1055–1063.
- [7] Tsuda A, Henry FS, Butler JP: Gas and Aerosol Mixing in the Acinus. *Respir Physiol Neurobiol* 2008; 163: 139–49.
- [8] Tsuda A, Laine-Pearson FE, Hydon PE: Why Chaotic Mixing of Particles is Inevitable in the Deep Lung. *J Theor Biol* 2011; 286: 57-66
- [9] Lambert RK, Wilson TA, Hyatt RE, Rodarte JR: A Computational Model for Expiratory Flow. *J Appl Physiol* 1982; 52(1): 44-56.
- [10] Pollak AG: A Forward Model for Maximum Expiration. *Comput Biol Med* 1998; 28: 613-625.
- [11] Ultman JS, Thomas MW: Longitudinal mixing in pulmonary airways: comparison of inspiration and expiration. J Appl Physiol 1979; 46(4): 799-805.
- [12] Scherer PW, Shendalman LH, Greene NM, Bouhuys A: Measurement of Axial Diffusivities in a Model of the Bronchial Airways. J. Appl. Physiol 1975; 38: 719-723.
- [13] Patankar SV: Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere, New York, NY, 1980.

- [14] ICRP: Human Respiratory Tract Model for Radiological Protection. ICRPPublication 66, *Ann ICRP* 1994; 24(1–3).
- [15] Heyder J, Gebhart J: Gravitational Deposition of Particles from Laminar Aerosol Flow through Inclined Circular Tubes. *J Aerosol Sci* 1977; 8:289-295.
- [16] Heyder J, Gebhart J, Rudolf G, Schiller CF, Stahlhofen W: Deposition of Particles in the Human Respiratory Tract in the Size Range 0.005–15 μm. J Aerosol Sci 1986; 17(5): 811–825.
- [17] Ingham DB: Diffusion of Aerosols from a Stream Flowing Through a Cylindrical Tube *J Aerosol Sci* 1975; 6:125-132
- [18] Cai FS, Yu CP: Inertial and Interceptional Deposition of Spherical Particles and Fibers in a Bifurcating Airway. J Aerosol Sci 1988; 19:679-688
- [19] Balásházy, I., Martonen, T., & Hofmann, W. Inertial impaction and gravitational deposition of aerosols in curved tubes and airway bifurcate ions. *Aerosol Science and Technology*, 1990; 13(3): 308-321.
- [20] Einstein, A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. Annalen der Physik, 1905; 322(8): 549–560.
- [21] Haefeli-Bleuer, B., & Weibel, E. Morphometry of the human pulmonary acinus. *The Anatomical Record*, 1988; 220(4): 401–414.
- [22] Wark, K., & Warner, C. Air Pollution Its Origin and Control Second Edition,. Harper & Row, 1981.
- [23] P. Filippitzis, K. Gourgoulianis, Z. Daniil and V. Bontozoglou 2020: The effect of alveolar mixing on particle retention and deposition investigated by a dynamic singlepath model. *Aerosol Science and Technology*, 54, 1102-1115.
- [24] Georgakakou, S., Gourgoulianis, K., Daniil, Z., & Bontozoglou, V. Prediction of particle deposition in the lungs based on simple modeling of alveolar mixing. *Respiratory physiology & neurobiology*, 2016; 225: 8-18

- [25] Quanjer, P. H., Tammeling, G. J., Cotes, J. E., Pedersen, O. F., Peslin, R., & Yernault, J.
  C. Lung volumes and forced ventilatory flows. European Respiratory Journal, 1993; 16:
  5-40
- [26] Taylor, G.I., Low Reynolds Number Flow (16mmFilm), Educational Services Inc., Newton, MA, 1960.
- [27] Ochs, M., Nyengaard, J. R., Jung, A., Knudsen, L., Voigt, M., Wahlers, T., Richter, J. & Gundersen, H. J. G. The number of alveoli in the human lung. American journal of respiratory and critical care medicine, 2004 ; 169(1): 120-124
- [28] J. K. Kodros J. Volckens S. H. Jathar J. R. Pierce. Ambient Particulate Matter Size Distributions Drive Regional and Global Variability in Particle Deposition in the Respiratory Tract, 2018.
- [29] C. David Cooper, F. C. Alley. Air Pollution Control: A Design Approach, third edition, Waveland Press Inc., 2002
- [30] Research by British Lung Foundation : Spirometry and reversibility testing, 2020
- [31] Cussler, E. L. Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems, 3rd Edition, Cambridge University Press, 2009
- [32] Ottino, J.M. The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos and Transport, Cambridge University Press, 1989.
- [33] Egan MJ, Nixon W, Robinson NI, James AC, Phalen RF: Inhaled Aerosol Transport and Deposition Calculations for the ICRP Task Group. J Aerosol Sci 1989; 20(8): 1301-1304.