



TESIS DOCTORAL

**PARAMETRIZACIÓN DE UN MODELO 3D DEL PULMÓN PARA
ESTUDIOS DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL**

ALFONSO CARLOS MARCOS ROMERO

DEPARTAMENTO DE EXPRESIÓN GRÁFICA

Conformidad de los directores:

Fdo: Dr. Joaquín Fernández Francos

Fdo: Dr. José Luis Canito Lobo

2015

AGRADECIMIENTOS

Mi más sincero agradecimiento a todas aquellas personas que directa o indirectamente han contribuido a que esta Tesis haya sido posible ya sea por sus contribuciones personales o profesionales.

Agradecer en primer lugar a mis Directores de Tesis, Joaquín Fernández Francos y José Luis Canito Lobo, por poder contar con ellos en todo momento y por el apoyo y confianza que han depositado en mí. Gracias por guiarme en mis primeros pasos en mi andadura por la Universidad.

A Eduardo Blanco por el apoyo continuo a nuestro trabajo sin el que no hubiera sido posible y por orientarnos siempre en la dirección correcta.

A mis compañeros del departamento de Expresión Gráfica y del área de Mecánica de Fluidos de la Escuela de Ingenierías Industriales de Badajoz, por haberme ayudado a crecer como investigador, docente y persona.

A nuestros compañeros de investigación de la Universidad de Oviedo y del Instituto Nacional de Silicosis. Un trabajo de este tipo es inviable sin una colaboración interdisciplinar entre buenos profesionales de distintas áreas.

A mi familia, especialmente a mis padres que se han esforzado por darme todas las oportunidades para llegar hasta aquí y a mi pareja por su apoyo constante.

A todos, muchas gracias.

ÍNDICE

ÍNDICE

1.	Introducción	011
1.1.	Motivación y objetivos	013
1.2.	Estructura de la tesis	022
2.	Principios teóricos	025
2.1.	Fisionomía de los pulmones	027
2.2.	Enfermedades pulmonares obstructivas crónicas	035
2.3.	Dinámica de fluidos computacional	042
2.4.	Técnicas de modelado y parametrizado	048
2.5.	Conclusiones	057
3.	Estado del Arte	059
4.	Metodología propuesta	087
4.1.	Modelos previos	089
4.2.	Modelo paramétrico del pulmón	100
4.3.	Resultados	121
5.	Aplicaciones prácticas del modelo	123
5.1.	Modelo numérico	125
5.1.1.	Mallado	125
5.1.2.	Ecuaciones fluido dinámicas.	129
5.1.3.	Condiciones de contorno.	134
5.1.4.	Parámetros de cálculo	136
5.2.	Validación del modelo	137
5.3.	Conclusiones	140
6.	Conclusiones y futuras líneas de trabajo	141
6.1.	Conclusiones	143
6.2.	Futuras líneas de trabajo	145
	Bibliografía	155
	Índice de figuras	167
	ANEXOS	169
I.	Parámetros del modelo	171
II.	UDFs	175
III.	Artículos publicados	185

1. INTRODUCCIÓN

1. INTRODUCCIÓN

Se pretende poner en valor las motivaciones que han llevado a desarrollar un modelo paramétrico de las vías aéreas humanas.

En el mismo capítulo se plantea el objetivo general de la tesis y se desarrollan una serie de objetivos específicos para este trabajo.

Por último, se describe la estructura de la tesis.

1.1. Motivación y objetivos

La presente tesis doctoral trata la modelización tridimensional de las vías aéreas inferiores del cuerpo humano para su estudio numérico, mediante técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD), con el objetivo de estudiar el comportamiento del flujo de aire.

El estudio del intercambio de aire en el sistema respiratorio humano juega un papel muy importante en medicina e ingeniería biomédica. El mayor interés en este campo de investigación se centra en la aplicación de aerosoles, diagnóstico de enfermedades pulmonares y fenómenos de ventilación de alta frecuencia. Aunque los procesos químicos y la función general del sistema respiratorio están muy bien estudiados, aún representa un desafío la correcta descripción de la mecánica del fluido en este intercambio de gases. Esto es debido a que el pulmón humano presenta una forma extremadamente compleja, asimétrica e irregular, incluso variando de unos individuos a otros. (K. Freitas, 2008)

El sistema respiratorio no debe su importancia sólo a su función respiratoria, sino que también cumple otras misiones en el organismo como la de filtro externo para atrapar y expulsar las partículas contaminantes del aire, eliminar tóxicos volátiles del aire como el alcohol, la eliminación de fármacos y medicamentos, el equilibrio ácido-base o sistemas hormonales.

Otro hecho a tener en cuenta, es que los pulmones son la vía de entrada para fármacos como antiasmáticos, antihistamínicos, descongestivos, expectorantes etc... de cuya correcta distribución en las vías aéreas depende su eficacia y que precisan de un estudio previo de tipo y tamaño de partículas, método de dosificación, etc...

Las enfermedades pulmonares son uno de los mayores problemas para la salud mundial siendo la causa de aproximadamente una de cada seis muertes en el mundo, una de cada 8 en Europa, dónde se producen 6 millones de ingresos hospitalarios anuales. El impacto de las enfermedades pulmonares sigue siendo en la actualidad tan importante como lo era a finales del siglo XIX, y es probable que esta situación continúe durante varias décadas. Más de la mitad de las muertes están relacionadas con el cáncer de pulmón o EPOCs debidos al tabaco.

Las enfermedades pulmonares causan por tanto discapacidad y muerte prematura y tienen además un coste enorme para la atención primaria, los cuidados y los tratamientos hospitalarios, además de la pérdida de productividad de aquellas personas que no pueden trabajar y los que mueren prematuramente a causa de la enfermedad. El cálculo del coste económico de estas enfermedades es complejo. Se estima el coste anual para la Unión Europea de más de 380.000 millones de euros, siendo la carga más grande para las EPOCs y el asma con más de 200.000 millones de euros. (European Lung Foundation)

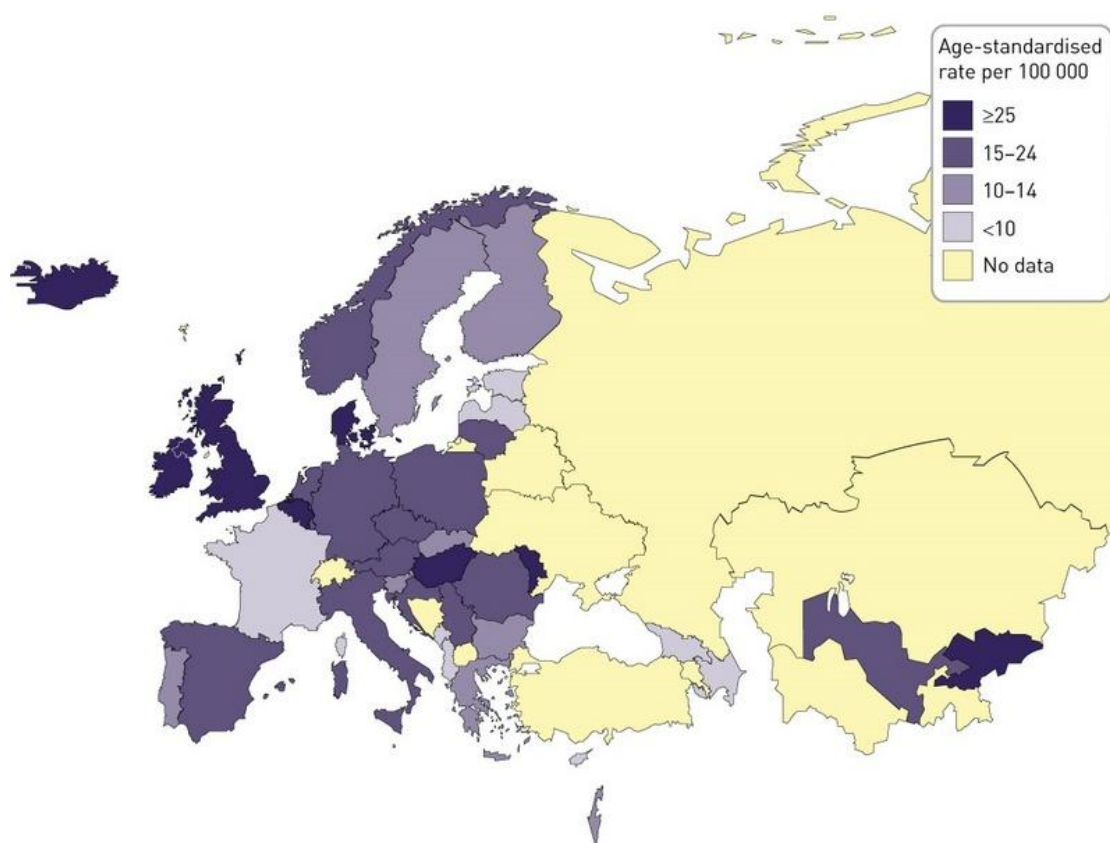


Figura 1.1: Tasa de mortalidad por EPOCs en Europa. (European Lung Foundation).

En España las enfermedades pulmonares obstructivas crónicas afecta a más de 2,1 millones de personas, es la causante de 50 muertes diarias y origina un gasto sanitario que supera los 2.600 millones de euros anuales. A comienzos de 2015, el Servicio Andaluz de Salud alertó de picos de sobrecarga en los servicios de neumología de los hospitales públicos andaluces de hasta el 157%. En 2014, en el IV Symposium Internacional sobre EPOC y tabaquismo, se alertó que el 70% de los fumadores tienen síntomas de la enfermedad pulmonar obstructiva crónica sin diagnosticar y que la mayoría desconocen que la padecen, como puede observarse en la figura 1.2. para el caso de España. Estos síntomas son tos constante, expectoración, fatiga y catarros prolongados.

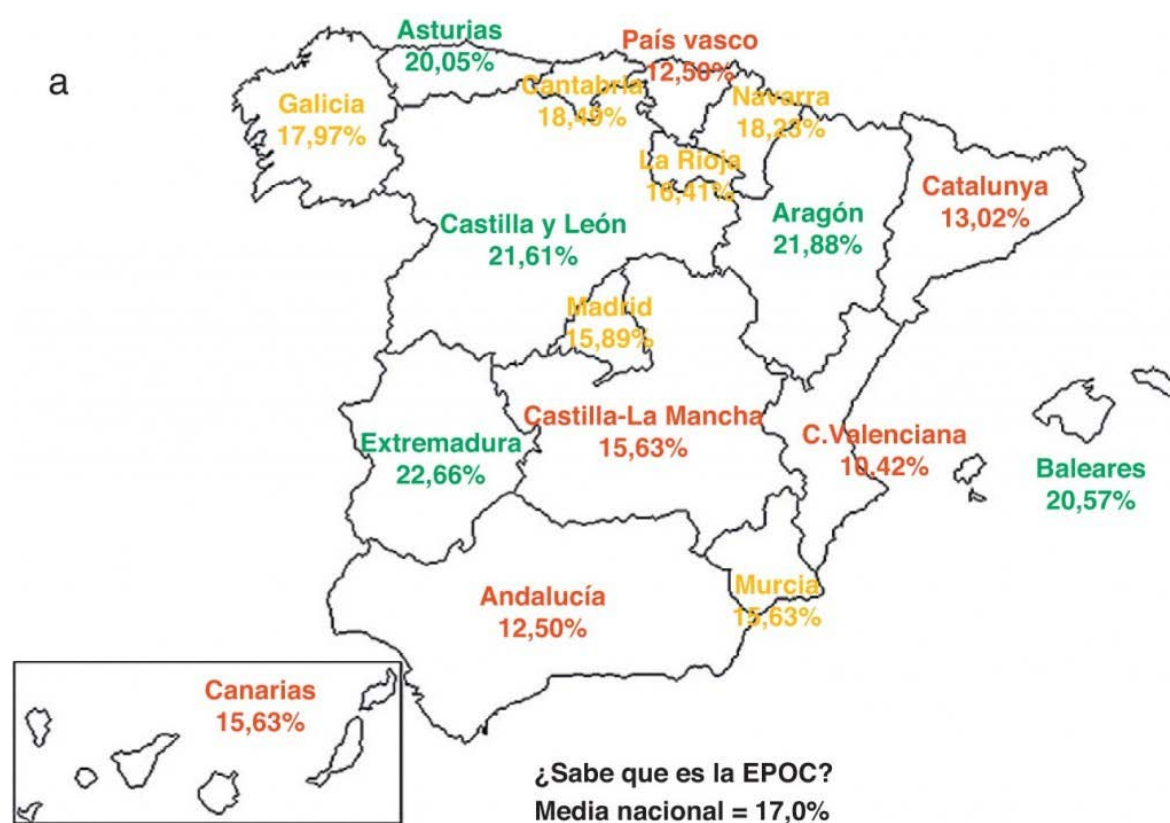


Figura 1.2: Nivel de conocimiento de la enfermedad en España. (J.B.Soriano 2012).

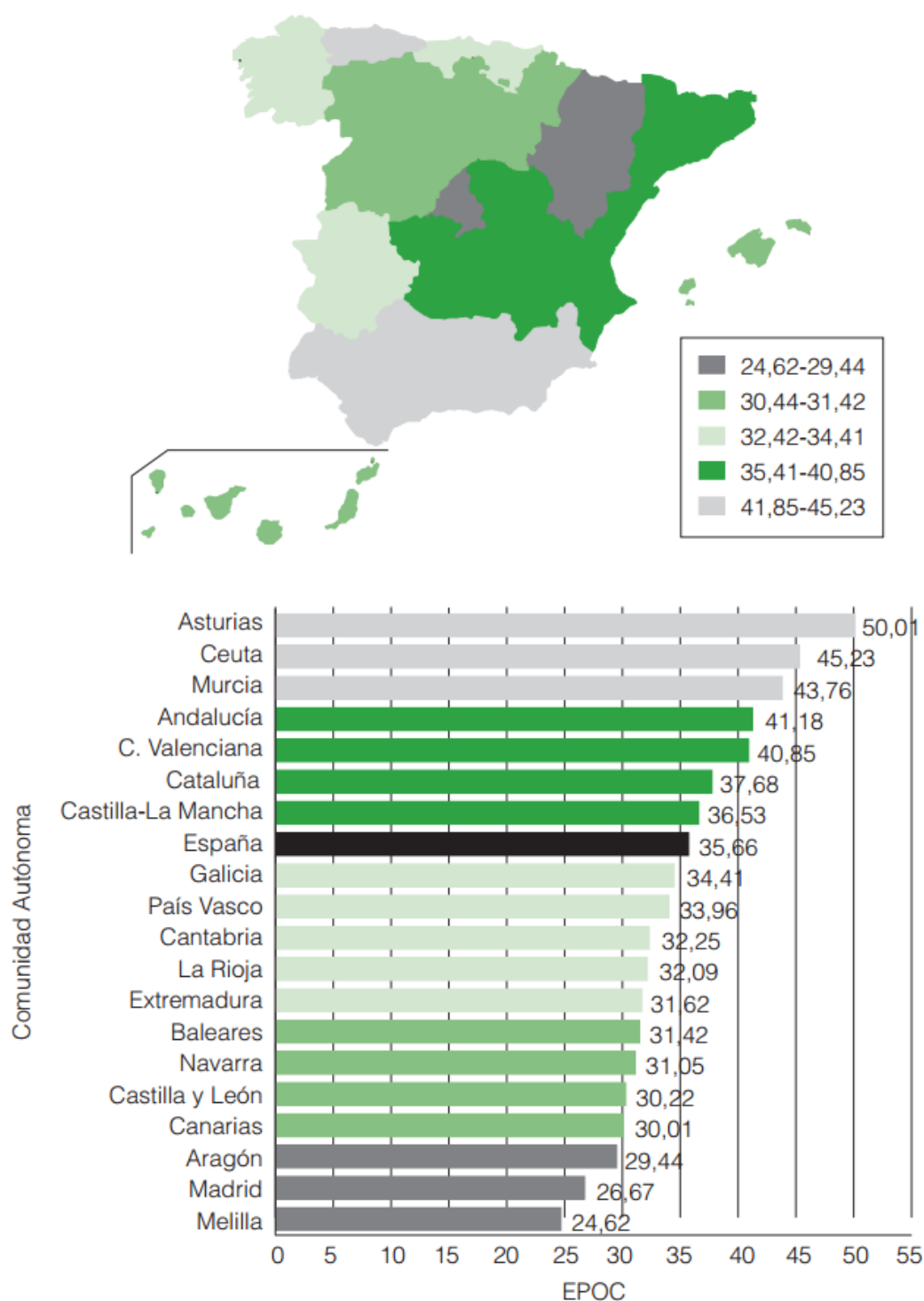


Figura 1.3: Mapa de mortalidad para los hombres por Comunidades Autónomas. (2006). Tasa ajustada a la población europea/100.000. (Centro Nacional de Epidemiología).

Las vías aéreas son también la entrada de la contaminación del aire exterior al organismo. Un adulto medio respira más de 15 m³ de aire cada día, el cual puede arrastrar algún tipo de contaminante. Se considera un contaminante del aire cualquier sustancia que pueda, en concentraciones elevadas, dañar a humanos, animales, vegetación o materiales.

Las administraciones públicas están tomando consciencia de la importancia de invertir en investigación en torno al sistema respiratorio y los pulmones de cara a atajar este problema.

La European Lung Foundation plantea la necesidad de más investigación interdisciplinaria para abordar las enfermedades crónicas en Europa, de manera que tanto la UE como los estados miembros deben impulsar la financiación de la investigación biomédica. Ya en el año 2012 la FAD (Food and Drug Administration) de los Estados Unidos lanzó una convocatoria para proyectos de investigación para desarrollar modelos numéricos que simulasen la deposición de partículas inhaladas con el fin de obtener una más eficaz y segura administración de medicamentos por vía respiratoria. Cada vez existe una mayor presencia de estudios de este tipo en el campo de las técnicas de CFD, pero aún queda mucho camino por recorrer.

Una manera de entender la relevancia que estos estudios están alcanzando en los últimos años es estudiar los principales foros donde se publican y debaten los avances en el estudio del funcionamiento y enfermedades de las vías aéreas humanas, las publicaciones científicas. La neumología y en concreto el estudio de la respiración es una especialidad de la medicina que ha crecido tanto en las últimas décadas que ha hecho que surjan gran número de líneas de investigación en diferentes subespecialidades. Paralelamente, este hecho ha resultado en una gran variedad de revistas científicas que albergan cada una de estas nuevas áreas.

Muchas de estas revistas están afiliadas o pertenecen total o parcialmente a sociedades nacionales o internacionales como es el caso de la revista European Respiratory Society y la American Thoracic Society y otras simplemente son propiedad de una editorial comercial. Los nuevos y rápidos avances que se están obteniendo en este campo han tenido como consecuencia un importante

crecimiento de estas revistas que ha hecho a su vez que algunas de ellas se hayan fusionado y que otras hayan cambiado de nombre para especializarse aún más. La web y los sistemas de publicación online han hecho que esta tendencia al alza se incremente aún más en los últimos años.

Rank	Publication title	Impact factor
1	American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine	11.041
2	Thorax	8.376
3	European Respiratory Journal	6.355
4	CHEST	5.854
5	Journal of Heart and Lung Transplantation	5.112
6	Journal of Thoracic Oncology	4.473
7	American Journal of Respiratory Cell and Molecular Biology	4.148
8	Respiratory Research	3.642
9	Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery	3.526
10	American Journal of Physiology – Lung Cellular and Molecular Physiology	3.523
11	Annals of Thoracic Surgery	3.454
12	Lung Cancer	3.392
13	Current Opinion in Pulmonary Medicine	3.119
14	Tuberculosis	3.033
15	Journal of Aerosol Medicine and Pulmonary Drug Delivery	2.894

Figura 1.4: Lista de las primeras 15 publicaciones en la categoría de sistema respiratorio en el JCR de 2012. (European Lung Foundation).

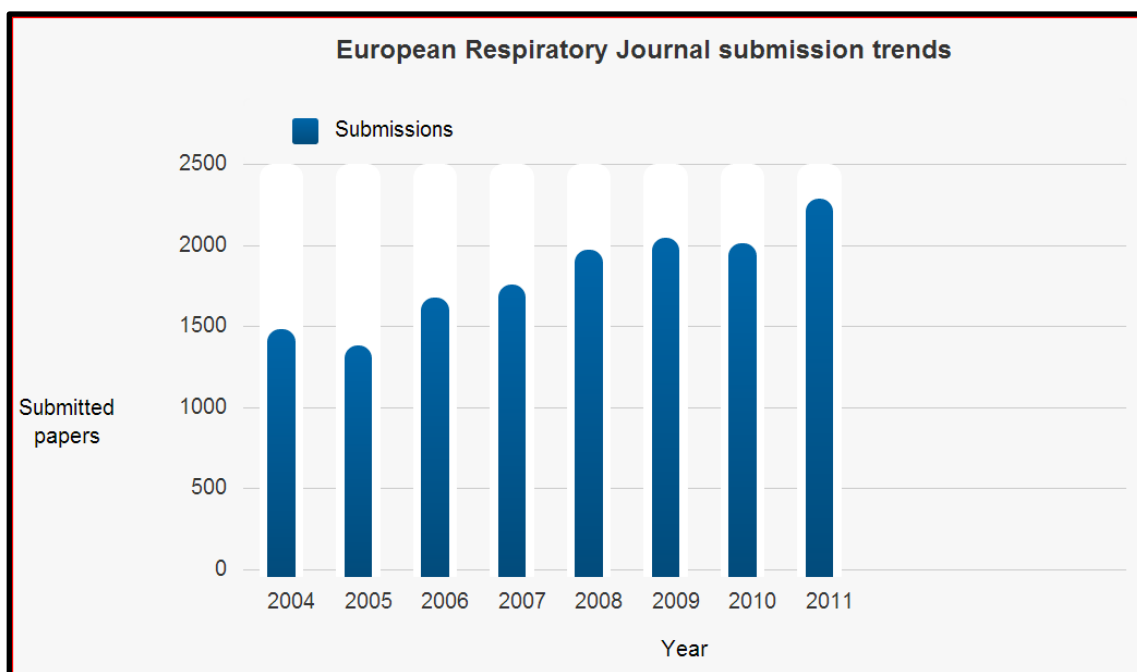


Figura 1.5: Tendencias de la llegada de publicaciones a la revista European Respiratory Journal. (European Lung Foundation).

Los cinco temas principales en la investigación en torno a los pulmones según el libro blanco de la European Respiratory Society son:

1. El origen de las enfermedades pulmonares.
2. El estilo de vida y la salud pulmonar.
3. Los pulmones y el medio ambiente.
4. Defensas e infecciones pulmonares.
5. Enfermedades pulmonares en una población cada vez más vieja.

Una de las conclusiones a las que se llega en este estudio, es que la investigación médica respiratoria es vital para el futuro de la salud en Europa, por lo que los programas nacionales y europeos de investigación deben reflejarlo en mayor medida en la próxima década. Igualmente, expresa la necesidad de más investigación aplicada que traiga avances y conocimientos científicos a la práctica clínica, por lo que existe una gran necesidad de encontrar formas eficaces de colaboración entre las diferentes disciplinas de investigación.

Este trabajo supone el inicio de una línea de investigación no existente hasta ahora en la Universidad de Extremadura. En España sólo existen dos estudios previos (Casan 2003 y Quispe 2010). Debido a la naturaleza del estudio, se está

llevando a cabo por un equipo multidisciplinar compuesto además de investigadores del Departamento de Expresión Gráfica de la Escuela de Ingenierías Industriales de Badajoz, de la Universidad de Extremadura, por investigadores del Departamento de Mecánica de Fluidos de la Universidad de Oviedo y del Instituto Nacional de Silicosis de Oviedo. Se dio inicio a esta línea de investigación con modelos sencillos de las primeras bifurcaciones del árbol bronquial a partir de las cuales se ha ido mejorándolo, haciéndolo más complejo al asimilarlo al pulmón humano. Se han estudiado desde modelos con geometrías sencillas simétricas, a otros más realistas basados en geometrías más realistas propuestas por otros autores. Modelos con apenas un par de generaciones y otros más complejos, llegando a disponer de modelos tridimensionales de cierto realismo para estudiar los fenómenos respiratorios y la deposición de partículas hasta la séptima generación y finalmente toda la zona conductiva del pulmón. El paso por estas fases previas de estudio ha llevado a comprender mejor, de una forma cualitativa, cómo influyen las diferentes variables geométricas del pulmón humano en el desarrollo del flujo de aire y en la forma en que se depositan las partículas en el mismo. Así mismo, ha sido posible entender cómo afectan otro tipo de variables geométricas simuladas para estudiar el efecto de enfermedades obstructivas crónicas en las vías aéreas. Todos estos diferentes modelos y variantes de los mismos nos han llevado a trabajar con un modelo en el que su geometría está representada por parámetros que puedan ser modificados antes de cada simulación, y poder de esta forma estudiar cómo afectan estos cambios al flujo de aire y a la deposición de partículas de forma más rápida y precisa. Hay que tener en cuenta que estos cambios pueden deberse a mejoras que quieran establecerse sobre un modelo anterior, adecuación de la geometría del modelo al caso de una geometría específica de un paciente concreto, o a la simulación de patologías pulmonares.

El objetivo general de esta tesis es por tanto **obtener un modelo paramétrico de las vías aéreas del pulmón humano que poder utilizar en diferentes tipos de simulaciones fluidodinámicas.**

Para alcanzar el objetivo general propuesto se definen los siguientes objetivos específicos:

- 1) Estudiar los diferentes modelos propuestos por otros autores que se encuentran en la bibliografía.
- 2) Determinar una serie de parámetros que definan la morfología del pulmón a modelar.
- 3) Desarrollar una metodología de modelado que contenga los parámetros anteriores y que permita obtener un modelo mallable.
- 4) Modelar las vías aéreas superiores para añadirlas al modelo paramétrico.
- 5) Obtener un mallado del modelo que permita simular mediante técnicas de dinámica de fluidos computacional el flujo de aire en el mismo.
- 6) Obtener diferentes resultados para varios puntos de diseño del modelo.
- 7) Establecer un punto de partida para nuevas aplicaciones en la investigación del funcionamiento de enfermedades pulmonares obstructivas crónicas.

1.2. Estructura de la tesis

Este documento se divide en siete capítulos y dos anexos.

El **capítulo primero** recoge la motivación que da lugar a este trabajo, así como el objetivo principal y los específicos que se pretenden alcanzar con el mismo. Se hace así mismo un acercamiento al problema incidiendo en la importancia de la aplicación del dibujo paramétrico.

En el **segundo capítulo** se recogen los principios teóricos base del trabajo realizado. En primer lugar se presenta la fisonomía del pulmón y la naturaleza de las enfermedades pulmonares obstructivas crónicas para que pueda entenderse mejor la línea de trabajo seguida. A continuación se hace necesario, por el mismo motivo, explicar los métodos de trabajo paso a paso en CFD que serán aplicados a continuación al modelo en cuestión.

El primer paso para abordar el problema de la simulación del pulmón humano fue obtener un modelo 3D del mismo. En este capítulo se recogen también los principios y técnicas de modelado más importantes usadas para representar el modelo de pulmón. Esta tarea, como se explicará más adelante, es bastante laboriosa debido a la compleja fisonomía del pulmón humano. Los trabajos que han conducido a la presentación de esta tesis se han realizado sobre diferentes modelos

de pulmón de complejidad creciente conforme se ha avanzado en el estudio de las simulaciones en los mismos. Esto ha llevado a estudiar desde las representaciones más simples, a otras más clásicas como la presentada por E.R. Weibel (1963), hasta llegar por fin a la aproximación que se presenta en este trabajo. A continuación se tratarán los beneficios de utilizar técnicas de modelado paramétrico en la representación del pulmón humano para la simulación numérica. Estos modelos paramétricos son con los que se trabajará en las futuras líneas de investigación de las que también se tratará en uno de los capítulos.

El **capítulo 3** hace un repaso por los diferentes modelos numéricos propuestos por otros grupos de investigación que servirán de base para el modelo presentado en este trabajo. Se pretende recoger así el estado del arte en cuanto a la utilización de modelos numéricos tridimensionales para el estudio del flujo del aire en las vías respiratorias altas humanas.

En el **capítulo 4** se plantea la metodología de modelado y parametrización seguidas para la obtención del modelo. Para ello, previamente se recogen los diferentes modelos no paramétricos planteados desde el inicio de la línea de investigación y que sirvieron de base para estudiar las características geométricas principales del árbol bronquial con el fin de seleccionar los parámetros más importantes para el modelo.

El **capítulo 5** recoge las aplicaciones prácticas para el modelo creado dentro del campo de la simulación numérica que servirán de validación del modelo. Se estudia el modelo como punto de partida para un estudio CFD, y por tanto el primer paso será verificar la limpieza de la geometría. A continuación, se detalla el proceso de mallado, las condiciones de contorno y el modelo numérico seguido para realizar la simulación.

En CFD, el modelo más complejo no tiene porqué ser el que nos dé la clave en la solución del problema estudiado. Especialmente en casos tan complejos como el estudio del comportamiento del flujo respiratorio en el pulmón humano, donde a día de hoy es casi imposible obtener un modelo totalmente realista, y mucho menos simularlo, las simplificaciones deben estudiarse de forma muy cuidadosa en función del fenómeno que se pretenda estudiar si se quiere obtener un resultado fiel o al

menos cercano a la realidad. Estas simplificaciones nos permiten ahorrar gran cantidad de tiempo y costes de computación o aislar un fenómeno físico del resto para estudiar su influencia en el conjunto. El modelado y posterior mallado de un modelo válido para el estudio consume gran parte del tiempo de la investigación. Gracias a la aplicación al modelo de pulmón de la técnica de modelado paramétrico presentada en este trabajo, es posible modificar sin demasiada dificultad los parámetros claves de este modelo, obteniendo distintos puntos de diseño que permiten estudiar las influencias de diferentes aspectos morfológicos del pulmón.

En el siguiente capítulo, **capítulo 6**, se establecen las conclusiones finales del trabajo y se recogen las líneas futuras de trabajo.

Finalmente se presentan las referencias bibliográficas utilizadas en el documento y se adjuntan tres anexos en los que se recogen los diferentes artículos publicados en revistas y congresos a raíz del trabajo desarrollado en la presente tesis doctoral, la lista de parámetros del modelo y la información sobre las UDF empleadas en la simulación.

2. PRINCIPIOS TEÓRICOS

2. PRINCIPIOS TEÓRICOS

La generación de un modelo paramétrico capaz de reproducir ciertas patologías para las vías aéreas humanas, exige un estudio previo de la fisionomía de las mismas, siendo preciso describir igualmente los aspectos más característicos de estas enfermedades.

Para entender el proceso seguido y las funciones del modelo tridimensional paramétrico propuesto, se hace necesario explicar cuál es el flujo de trabajo en las técnicas de dinámica de fluidos computacional.

Por último se explican los fundamentos del dibujo paramétrico que han sido aplicados en la edición del modelo.

2.1. Fisionomía de los pulmones

El objetivo de esta tesis es el modelado de la zona conductiva de las vías pulmonares bajas: tráquea y bronquios con el objetivo de estudiar diferentes fenómenos que ocurren en los mismos relacionados con enfermedades obstructivas crónicas, transporte y depósito de partículas.

Como se explicará más adelante, el modelado es una parte fundamental para el estudio numérico de cualquier problema fluidodinámico, y en el caso de la simulación del pulmón humano lo es aún más debido a su gran complejidad.

El estudio del intercambio de aire en el sistema respiratorio humano juega un papel muy importante en Medicina e Ingeniería Biomédica, centrando su interés en la aplicación de aerosoles, el diagnóstico de enfermedades pulmonares, y fenómenos de ventilación de alta frecuencia. Aunque los procesos químicos y la función general del sistema respiratorio ya son conocidos, la correcta descripción fluidodinámica en este intercambio de gases aún representa un desafío, debido a que el pulmón humano presenta una forma extremadamente compleja, asimétrica e irregular variando incluso de unos individuos a otros.

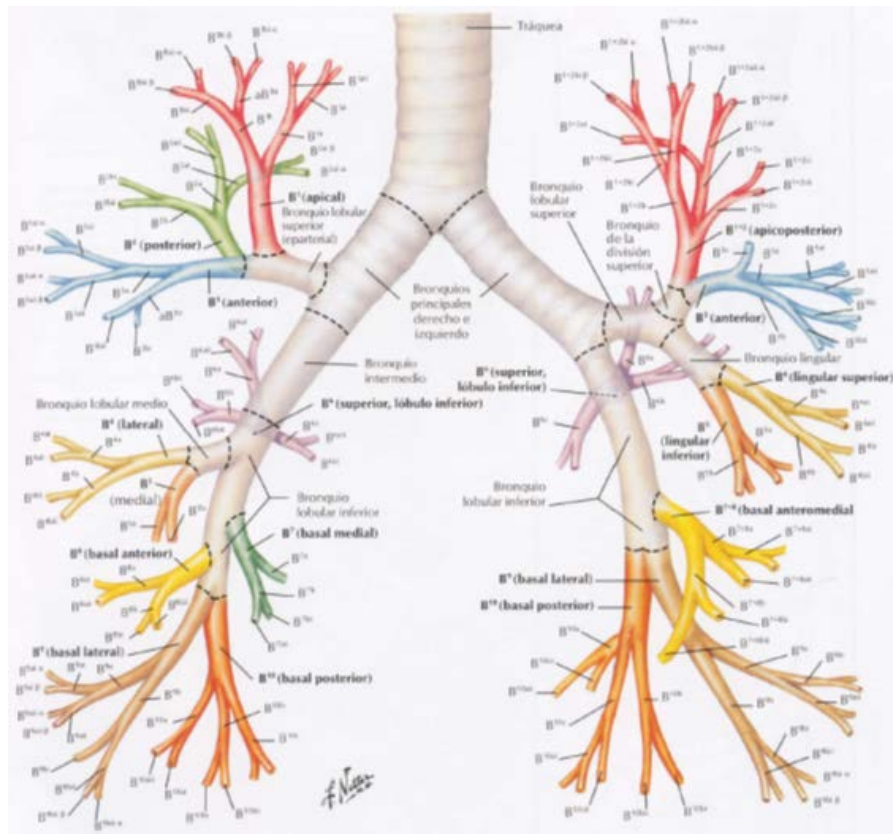


Figura 2.1: Esquema del árbol bronquial. (F Netter).

Los pulmones son uno de los órganos más grandes del cuerpo humano. Situados a ambos lados del corazón, están protegidos por la caja torácica y cubiertos por una doble membrana serosa llamada pleura entre la que se encuentra el líquido pleural.

La principal función de los pulmones es la distribución de oxígeno y el intercambio de gases, recibiendo la sangre oxígeno del aire a través de éstos y desprendiendo dióxido de carbono, para lo que aumentan su tamaño en la inspiración y vuelven a su tamaño normal en la espiración gracias al descenso del diafragma y a la elevación de las costillas. Los movimientos respiratorios son posibles gracias a los músculos intercostales, los abdominales y el diafragma. Durante la inspiración los músculos intercostales se contraen, las costillas se elevan, el diafragma se contrae y tira de los pulmones hacia abajo, resultando la

combinación de todos estos movimientos en un aumento de volumen de la caja torácica, con la consiguiente entrada de aire en los pulmones. En el caso de la espiración, los músculos intercostales se relajan, las costillas bajan, el diafragma se relaja y la combinación de todos estos movimientos resulta en una disminución del volumen de la caja torácica, lo que lleva finalmente a la salida del aire de los pulmones.

Se requiere una gran superficie de contacto entre el aire y la sangre, junto con una barrera de tejido muy delgada para permitir una adecuada absorción del oxígeno. Esta superficie es en los pulmones del orden del tamaño de una pista de tenis (Weibel, 2009). En cualquier caso, estas características de diseño siempre plantean problemas, como la forma de ventilar y difundir sobre esa superficie de forma eficiente y uniforme, o cómo asegurar una estabilidad mecánica suficiente frente las fuerzas superficiales con un tejido de soporte mínimo. Para solventar estos problemas el pulmón tiene un diseño ingenioso basado en una geometría fractal que permite que esta gran superficie ocupe el limitado espacio de la cavidad torácica.

Se puede dividir el tracto respiratorio en tres zonas: la zona extratorácica, que se extiende desde la nariz o la boca hasta la tráquea y que puede considerarse como un primer filtro del sistema respiratorio; la zona traqueobronquial desde la tráquea hasta los últimos bronquios, y la zona alveolar donde se realiza el intercambio gaseoso. Los modelos sobre los que se ha trabajado en este estudio se basan principalmente en la zona traqueobronquial, aunque se ha tenido en cuenta igualmente la parte extratorácica.

La entrada de aire a los pulmones se realiza a través de la tráquea. Previamente el aire ha entrado a través de la boca y/o nariz, para pasar por la faringe, laringe y por último a la tráquea.

La nariz es la puerta de entrada del aire a las vías aéreas y tiene funciones de conducción y de acondicionador del aire respirado. Consta básicamente de dos bolsas o cavidades en la parte anterior de la cabeza, separadas por el tabique nasal y abiertas al exterior por dos orificios. Está delimitada en sus laterales por los

cornetes, ya en las fosas nasales, que se encargan de calentar y limpiar el aire que va hacia los pulmones.

En la respiración, el aire entra en el cuerpo a través de la nariz que lo conduce a su vez a las fosas nasales. La existencia de estos órganos radica en necesidad de que exista una cierta resistencia a la entrada de aire y que regule tanto su velocidad como su dirección. En el caso de la nariz, se estima que el 47% de la resistencia al paso del aire tiene lugar en ella.

Las fosas nasales están situadas sobre la cavidad bucal siendo el punto más alto de las vías aéreas. Su anatomía es bastante compleja. Son dos espacios que discurren paralelos y que están delimitados por cuatro paredes: superior, inferior, externa (con tres cornetes) e interna o tabique. Tienen una orientación ventrodorsal, aplanados transversalmente, más anchas en el sector caudal que en el cefálico, esto es, más altas que anchas, y más amplias por debajo que por arriba. Comunican con la faringe a través de dos orificios denominados coanas. A su vez, la boca también comunica con la faringe.

La faringe dispone de paredes musculares para impulsar los alimentos hacia el esófago y se mantiene abierta para permitir la respiración. Tiene una longitud de unos 13 centímetros y se sitúa tras la nariz y la boca, comunicando respectivamente la laringe y el esófago.

La faringe se divide en tres partes: nasofaringe, orofaringe y laringofaringe. La nasofaringe se sitúa tras cavidad nasal, comunicándose con ésta a través de las coanas en su parte frontal, mientras que a ambos lados presenta sendos orificios de comunicación con el oído a través de la trompa de eustaquio. La orofaringe se ubica delante de la boca y está limitada por arriba por el velo del paladar y por debajo por la epiglotis. La epiglotis es una estructura cartilaginosa que obstruye el paso del bolo alimenticio en el momento de la deglución evitando que este se vaya al sistema respiratorio. La laringofaringe se sitúa sobre la parte superior de la laringe, rodeándola por debajo de la epiglotis y se extiende hasta el límite con el esófago.

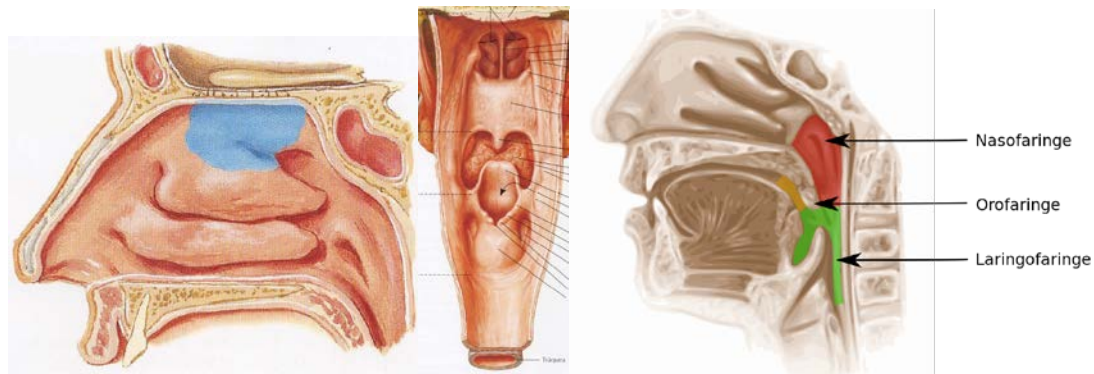


Figura 2.2: Detalle de las vías aéreas altas. (F. Netter / Wikipedia).

La laringe comunica la faringe con la tráquea siendo un órgano tubular constituido por cartílagos. Además de la conexión con la tráquea es el órgano de la fonación conteniendo la cuerdas vocales.

La tráquea es también de carácter cartilaginoso, formada por la superposición de anillos incompletos abiertos por el dorsal donde se ubica el músculo traqueal de un gran poder constrictor pero no dilatador. Dispone de entre 15 a 20 fíbulas cartilaginosas en forma de U que garantizan el diámetro de la luz. Tiene un longitud de unos doce centímetros de largo en los adultos y la particularidad de poder sufrir un estiramiento longitudinal de hasta un cincuenta por ciento sin sufrir un estrechamiento de su luz gracias a la elasticidad que le confiere la presencia de gran cantidad de fibras dispuestas longitudinalmente. Esto le permite alargarse en la inspiración y acortarse en la espiración. En su interior tiene una capa mucosa con epitelio ciliado pseudoestratificado. Entre las células ciliadas hay células caliciformes secretoras de moco. Los movimientos ciliares llevan el moco bronquial a la laringe. Estos movimientos van recogiendo las bacterias y las otra partículas, como el polvo atmosférico, capturadas por la mucosa y las trasladan hacia la garganta desde donde son expulsadas. La tráquea se bifurca a la altura de la IV vértebra torácica en dos conductos tubulares fibrocartilaginosos llamados **bronquios**. La bifurcación traqueal se caracteriza por una posición ligeramente hacia la derecha de la línea

media. Además, el último anillo traqueal es diferente, formando una especie de quilla, la carina de la tráquea.

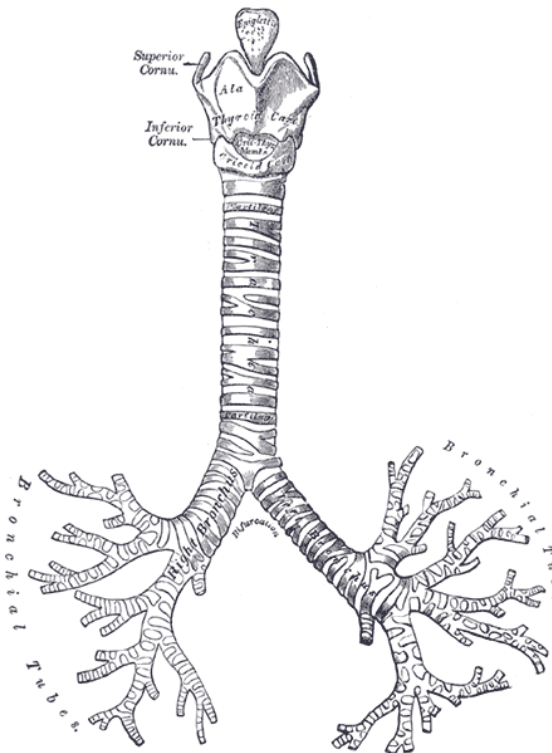


Figura 2.3: Tráquea, laringe y bronquios principales. (Wikipedia).

Los bronquios extrapulmonares recorren un corto trayecto entre la bifurcación de la tráquea y el punto de entrada en los pulmones. El bronquio derecho tiene mayor diámetro y sigue una trayectoria próxima al eje de la tráquea, por lo que los objetos extraños que entran a través de la laringe tienden a terminar en el lado derecho del pulmón. El bronquio izquierdo, debido a la desviación de la tráquea hacia la derecha, es más largo, además de tener menor diámetro, ser más horizontal y estar curvado lateralmente para pasar bajo la aorta y delante del esófago. Esta asimetría es debida a que el corazón tiene una inclinación oblicua hacia la izquierda quitando ese espacio al pulmón izquierdo. Los bronquios a su vez conducen el aire desde la tráquea a los bronquiolos que son ramificaciones progresivas arboriformes y de diámetro decreciente.

Los bronquios se dividen en bronquios lobulares, tres por la parte derecha y dos por la izquierda. Estos se dividen a su vez en dieciocho bronquios segmentales y finalmente en los denominados bronquiolos. Cada bronquio segmental accede a uno de los denominados segmentos broncopulmonares, que son unidades morfofuncionales del pulmón que tiene su propia arteria segmental. De esta forma, uno de estos segmentos puede ser extirpado conservando el resto del lóbulo pulmonar. El pulmón derecho está constituido por 10 segmentos, 3 en el lóbulo superior, 2 en el medio y 5 en el inferior, mientras que el izquierdo cuenta con 8 segmentos, 4 en el lóbulo superior y 4 en el inferior. Los bronquios segmentarios se dividen a su vez en bronquios propiamente dichos y estos a su vez en bronquiolos, estos ya de la generación 12 a 16.

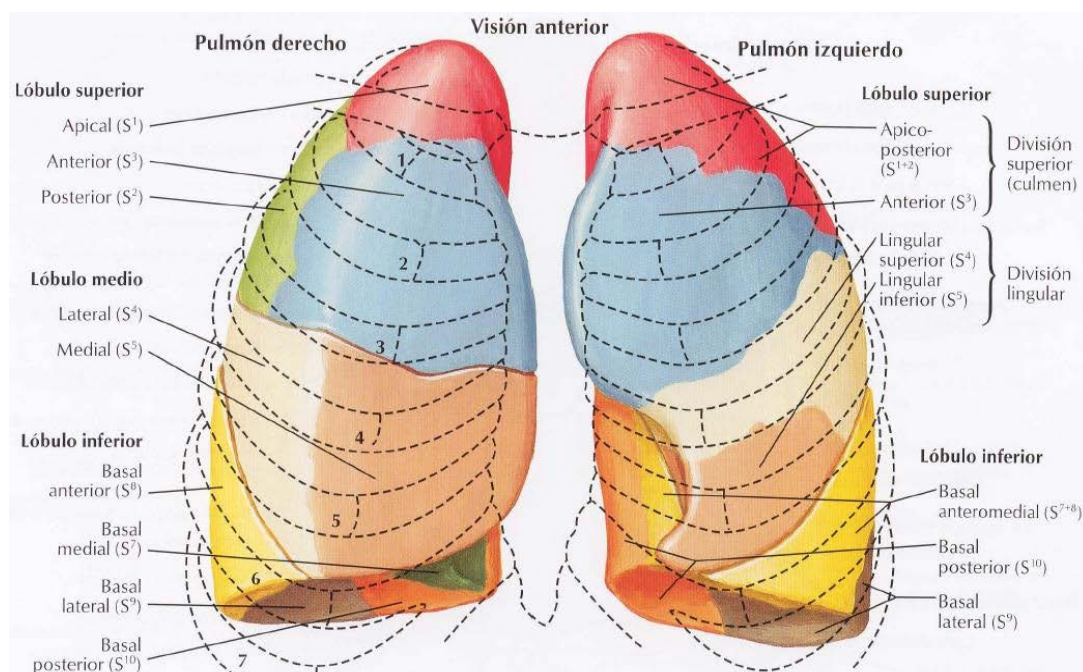


Figura 2.4: Lóbulos del pulmón humano. (F. Netter).

Los bronquios y bronquiolos que recorren el interior de los pulmones conforman una red de conductos extensa y compleja desde la tráquea hasta sus últimas ramificaciones. La pared de los bronquios está formada por cartílagos y capas musculares, al disminuir su diámetro van perdiendo cartílagos y adelgazando

las capas musculares y elásticas. En los bronquiolos la pared es únicamente musculatura lisa. Estos se ramifican en bronquiolos terminales y bronquiolos respiratorios, generaciones 17 a 19, que desembocan en los alveolos o sacos alveolares, que son las unidades funcionales de intercambio gaseoso.

Los pulmones humanos disponen de más de 500 millones de alvéolos, lo que supone una superficie de intercambio de gases de aproximadamente 70 m². En los alvéolos es donde se lleva a cabo el intercambio de gases respiratorios entre el medio aéreo del saco alveolar y la sangre del capilar sanguíneo que lo irriga. El oxígeno del aire inspirado, tras atravesar las vías respiratorias, llega a los sacos alveolares y difunde al capilar sanguíneo del alveolo pulmonar. Al mismo tiempo, el dióxido de carbono, residuo procedente del metabolismo celular, difunde desde el capilar sanguíneo hacia el alvéolo y de ahí al exterior atravesando las vías respiratorias. A este intercambio de gases respiratorios se le conoce como hematosis, que tiene lugar por difusión debido a la diferencia de presión entre el alveolo y la sangre para cada uno de los gases, que es proporcional a su concentración.

El aire que atraviesa el sistema respiratorio en la inspiración y el resultante de la espiración contienen ambos oxígeno y dióxido de carbono, simplemente el inspirado tiene mayor concentración en oxígeno y el espirado en dióxido de carbono. En cada respiración se intercambia al menos un litro y medio de aire con la atmósfera. Sin embargo los pulmones tienen una capacidad mayor, de unos tres litros de aire. El volumen de aire restante del pulmón es denominado en cuanto a la respiración volumen residual, y queda en el sistema respiratorio si producirse el intercambio gaseoso.

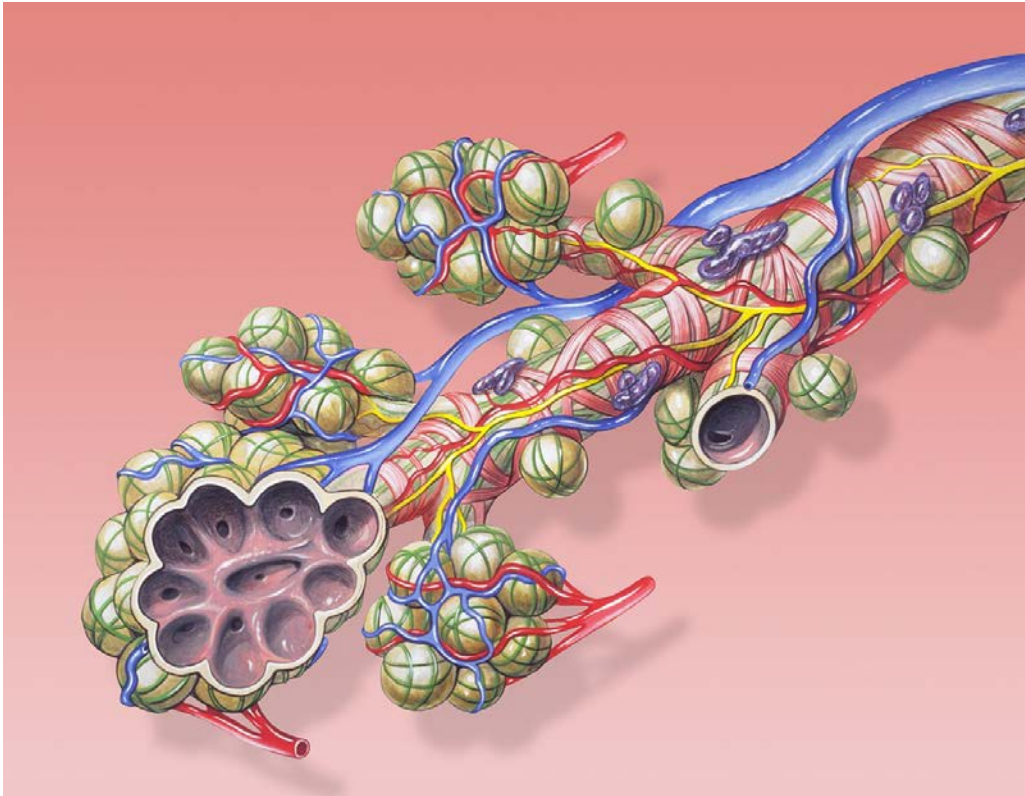


Figura 2.5: Detalle de los alvéolos. (Wikipedia).

2.2. Enfermedades pulmonares obstructivas crónicas

Uno de los principales motivos por los que se trata de realizar un modelo parametrizable de las vías aéreas respiratorias humanas es poder estudiar el efecto de las enfermedades pulmonares obstructivas crónicas (EPOCs) en el desarrollo del flujo del aire en la respiración.

La EPOC supone una obstrucción de las vías aéreas progresiva y, a veces, irreversible. Su origen por lo general suele ser el humo del tabaco (o de leña, aunque esta causa es cada vez menos frecuente en países desarrollados) y su síntoma principal es una disminución de la capacidad respiratoria.

Según la European Lung Foundation, los factores que producen las EPOCs son, más concretamente, los siguientes:

- ❖ Humo del tabaco. Es la principal causa, de manera que casi la mitad de las personas fumadoras (40-50%) son tendentes a desarrollar EPOC. (Las no fumadoras apenas alcanzan el 10%).
- ❖ Exposición ocupacional. Entorno al 15-20% de los casos de EPOC se deben a una exposición al polvo, productos químicos, vapores u otros contaminantes presentes en el aire en los lugares de trabajo.
- ❖ Contaminación del aire exterior e interior. La contaminación del aire debido principalmente al uso de combustibles de biomasa en la cocina o la calefacción también es factor del riesgo de EPOC.
- ❖ Estatus socioeconómico. Existen estudios que asocian el desarrollo de esta enfermedad a niveles económicos y de educación más bajos. Esto es debido a que este factor influye en una peor nutrición, calidad del aire, etc...
- ❖ Primeras etapas de la vida y factores ambientales. Otro factor de riesgo son las infecciones pulmonares a edades tempranas y las madres fumadoras.
- ❖ Factores genéticos. Algunas personas son más susceptibles que otras a desarrollar EPOC debido a su configuración genética. El problema genético más investigado en relación con la EPOC es una enfermedad denominada déficit de alfa-1 antitripsina; un problema heredado y por el cual a una persona le falta una proteína conocida como alfa-1 antitripsina.

Las EPOCs se asocian principalmente a dos enfermedades: El enfisema pulmonar y la bronquitis crónica.

El enfisema pulmonar se produce por la dilatación anormal y permanente de los espacios aéreos distales al bronquio alveolar con destrucción de sus paredes y sin signos de fibrosis. Por tanto, el enfisema pulmonar debilita el intercambio de gases que sucede en los alvéolos pulmonares. Este agrandamiento de los alvéolos los daña de forma permanente, disminuyendo y dificultando la respiración al tiempo que se estrechan las vías respiratorias.

La bronquitis crónica es una inflamación de los bronquios que tiene como consecuencia una reducción del flujo de aire en la respiración. Se produce

igualmente un aumento de mucosidad que obstruye las vías respiratorias. Esta enfermedad se considera crónica cuando se observa tos y expectoración durante 3 meses al año al menos 2 años consecutivos.

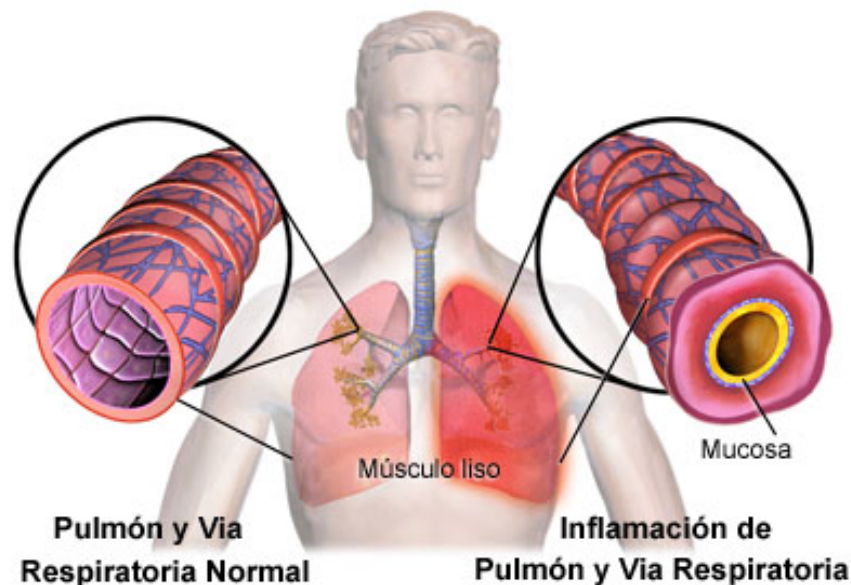


Figura 2.6: Diferencia entre las vías aéreas de un pulmón normal y otro con las vías obstruidas. (biodic.net)

La reducción del flujo de aire en las vías aéreas debido a una obstrucción de estos tipos puede ser fácilmente detectada a través de espirometrías, debido en gran parte a su bajo costo y a ser una técnica no invasiva. Es una prueba de sencilla aplicación e interpretación para medir el volumen pulmonar y la velocidad del flujo de aire espirado.

Los espirómetros son principalmente de dos tipos, de agua o campana y los secos. Los espirómetros de agua o campana son usados principalmente en laboratorios y fueron los primeros en utilizarse. Son más precisos pero más complejos de utilizar, basándose en la aspiración de un líquido a través de un tubo cilíndrico para medir el volumen de aire desplazado por el agua.

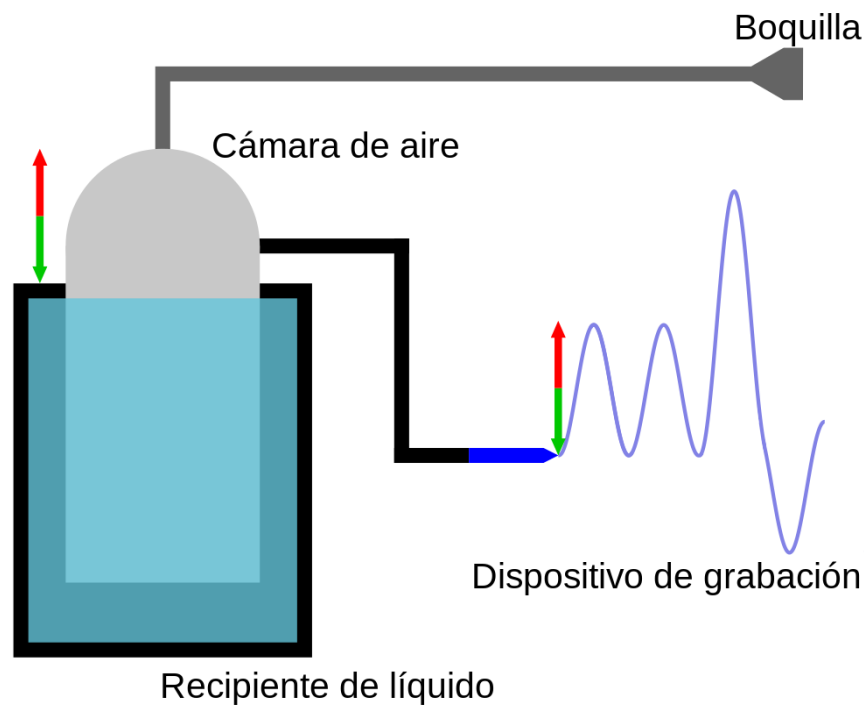


Figura 2.7: Ilustración del principio universal de un espirómetro. (Wikimedia Commons).

Los espirómetros secos son los más utilizados en la atención a pacientes debido a su portabilidad y menor coste. Entre los espirómetros secos se encuentran los espirómetros de fuelle, los neumotacógrafos y los de turbina. Actualmente los espirómetros utilizados son electrónicos, lo que ofrece una mayor velocidad de lectura, registro de datos, y procesamiento de los mismos con la ayuda de ordenadores.

La espirometría se emplea no sólo para el diagnóstico de pacientes con estos síntomas respiratorios, también para valorar el riesgo preoperatorio en pacientes que presenten síntomas respiratorios, para valorar la respuesta a determinados fármacos o para evaluar otras enfermedades que presenten afecciones pulmonares.

Existen dos tipos de espirometrías: la espirometría simple y la forzada.

En la espirometría simple se obtiene en una prueba en la que la persona tras respirar con normalidad realiza una inspiración máxima seguida de una espiración completa. En una espirometría simple se obtiene:

- Volumen Corriente (VC): Es el volumen total de aire que se usa durante el periodo normal, no forzado, de respiración, inspiración y espiración aunque por convenio se mide el volumen espirado, ya que no es exactamente igual al inspirado. Normalmente es de aproximadamente 500 ml.
- Volumen de reserva inspiratoria (VRI): Es el volumen máximo de aire que puede inspirar una persona partiendo del volumen corriente. Aproximadamente 3000 ml.
- Volumen de reserva espiratoria (VRE): Volumen de aire máximo que puede espirarse partiendo del volumen corriente. Unos 1100 ml en condiciones normales.
- Capacidad vital (CV): es la cantidad máxima de aire que puede inspirarse y espirarse en condiciones normales siendo la suma de los volúmenes corriente y de reserva inspiratoria y espiratoria.
- Capacidad vital forzada (CVF): es la capacidad máxima de inspiración y espiración en condiciones forzadas.
- Volumen residual (VR): este volumen no puede ser medido con el espirómetro. Corresponde al volumen de aire que permanece en el pulmón tras una espiración máxima. Suele ser de unos 1200 ml.
- Capacidad pulmonar total (CPT): suma del volumen residual y la capacidad vital.

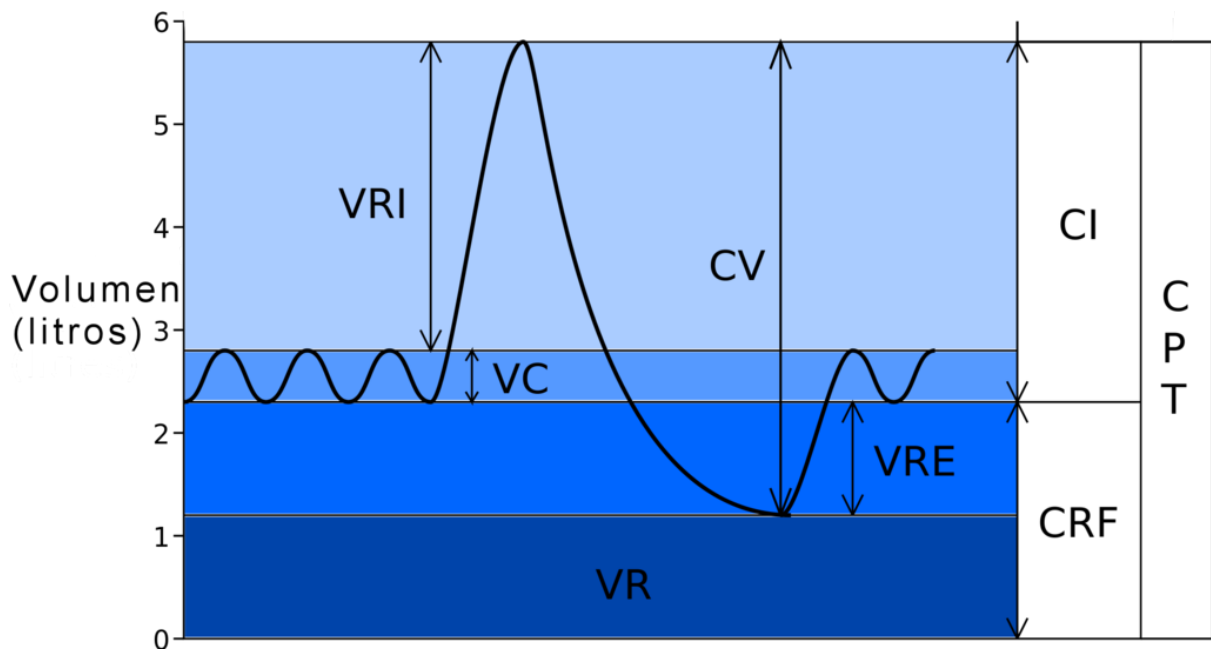


Figura 2.8: Volúmenes pulmonares estáticos. (Raimundo Pastor).

En la espirometría forzada se realiza una espiración máxima, con un máximo esfuerzo, tras una inspiración máxima con la intención de obtener gráficas que relacionan el volumen con el tiempo y el flujo de aire respecto al tiempo.

Los parámetros más utilizados de la espiración forzada son:

- Volumen espiratorio forzado (VEF_1): es el volumen máximo expulsado durante el primer segundo de la maniobra de espiración forzada.
- Capacidad vital forzada (CVF): es la cantidad de aire exhalado durante la espiración forzada con el mayor esfuerzo, la mayor rapidez que pueda emplearse en desalojarlo de los pulmones.
- Relación VEF_1/CVF : es la relación en tanto por ciento de los parámetros anteriores.

La prueba de espirometría forzada se representa gráficamente con dos tipos de curvas:

- Curva de volumen-tiempo. Relaciona el volumen exhalado en la prueba frente al tiempo que dura la misma. Se caracteriza por un inicio con una rápida subida que se suaviza enseguida hasta convertirse casi en horizontal.
- Curva de flujo-volumen: Relaciona el flujo de aire espirado con el volumen espirado durante la prueba. La gráfica representa una curva con un ascenso rápido hasta alcanzar el flujo máximo tras el que presenta un descenso menos pronunciado y casi lineal hasta alcanzar el flujo nulo aire nulo.

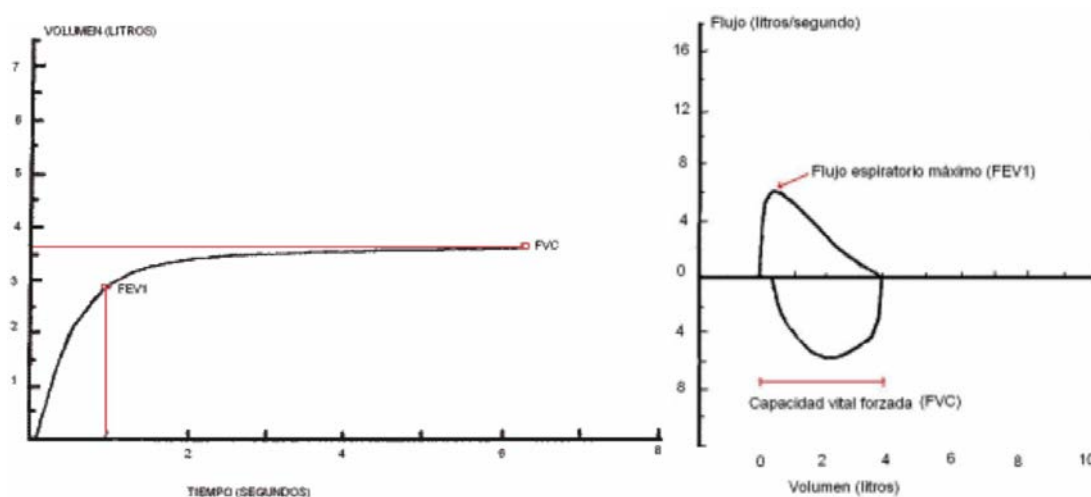


Figura 2.9: Curvas volumen-tiempo y flujo-volumen en una prueba espirométrica de un paciente sano. (Grupo MBE Galicia).

En un patrón obstructivo, en la curva de volumen-tiempo, se apreciará con claridad que el aire tarda más en expulsarse. Esto quedará reflejado en la gráfica con una curva con menor pendiente, se desplaza a la derecha, alcanzándose la CVF más tarde que en un paciente sano.

Por otro lado, una patología obstructiva de las vías aéreas hará que en la curva de flujo-volumen la parte descendente muestre una concavidad en lugar de la linealidad antes mencionada. Esta concavidad será tanto mayor cuanto más grave sea el grado de obstrucción.

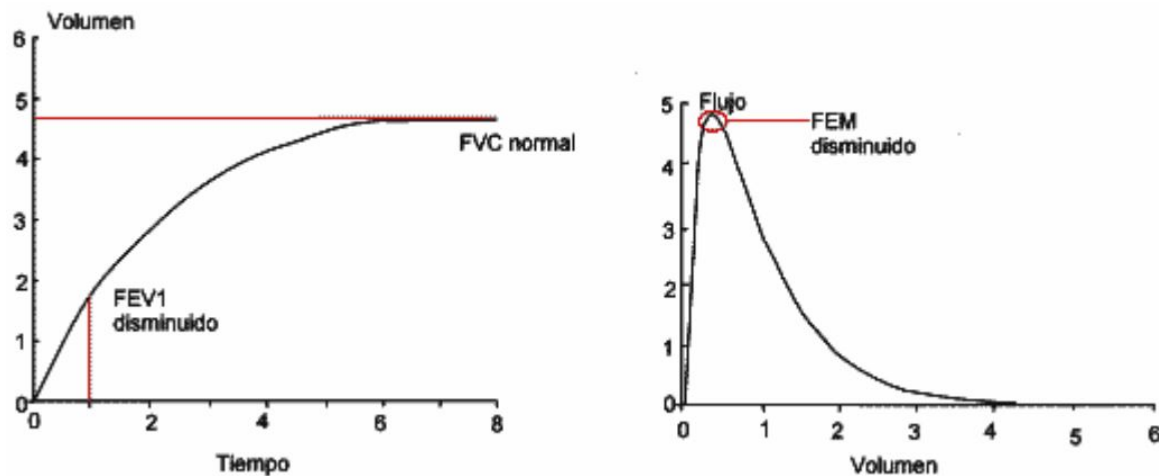


Figura 2.10: Curvas volumen-tiempo y flujo-volumen en una prueba espirométrica de un paciente con una patología obstructiva. (Grupo MBE Galicia).

Las pruebas espirométricas pueden detectar fácilmente cualquier anomalía respiratoria de tipo obstructivo en los pulmones. Si bien, no pueden indicar de qué tipo de patología de tipo obstructivo se trata.

Estas curvas pueden ser obtenidas mediante una simulación fluidodinámica con técnicas CFD que permitan hacer corresponder determinados patrones de estas gráficas a unas patologías de un tipo u otro. Así mismo, sirven de validación del modelo numérico empleado como se comentará más adelante.

2.3. Dinámica de fluidos computacional

Las técnicas de dinámica de fluidos computacional, más conocidas por su acrónimo en inglés, CFD (Computational Fluid Dynamics), se basan en utilizar ordenadores para la simulación del movimiento de los fluidos y otros fenómenos asociados como la transferencia de calor, las reacciones químicas, el arrastre de sólidos, etc. Para ello, el CFD se basa en métodos numéricos y algoritmos, resolviendo y analizando así problemas relacionados con los fluidos.

La historia de estas técnicas va unida a la evolución de los ordenadores. Los avances en las últimas décadas (las técnicas CFD surgieron en los años 70 con

simulaciones muy simples) tanto en software como en hardware, han sido muy importantes y eso ha permitido disponer de programas CFD en el mercado lo suficientemente rápidos potentes y fáciles de usar como para que resulte rentable su utilización a escala en proyectos industriales con las ventajas de un menor número de ensayos experimentales con prototipos reduciendo así el tiempo de ejecución del proyecto. Esto ha hecho que haya pasado de ser empleado solo a nivel de investigación a ser utilizado como una potente herramienta en problemas aplicados de ingeniería.

En la actualidad son múltiples los campos de aplicación de las técnicas CFD. Algunos campos de aplicación son la aerodinámica de vehículos terrestres, aviones, entrada y salida de vehículos espaciales; diseño de motores de combustión, calderas, turbomáquinas; refrigeración de equipos eléctricos y electrónicos; equipos para procesos físicos y químicos como reactores, sedimentadores, intercambiadores, etc.; desarrollo de sistemas de ventilación, calefacción, aire acondicionado; predicciones meteorológicas; influencia del viento en edificios, puentes, etc.; dispersión de contaminantes en la atmósfera, río y mares; hidrología y oceanografía; hidrodinámica de buques; o como en el caso de la presente tesis, biomedicina, como la circulación de la sangre o del aire en la respiración.

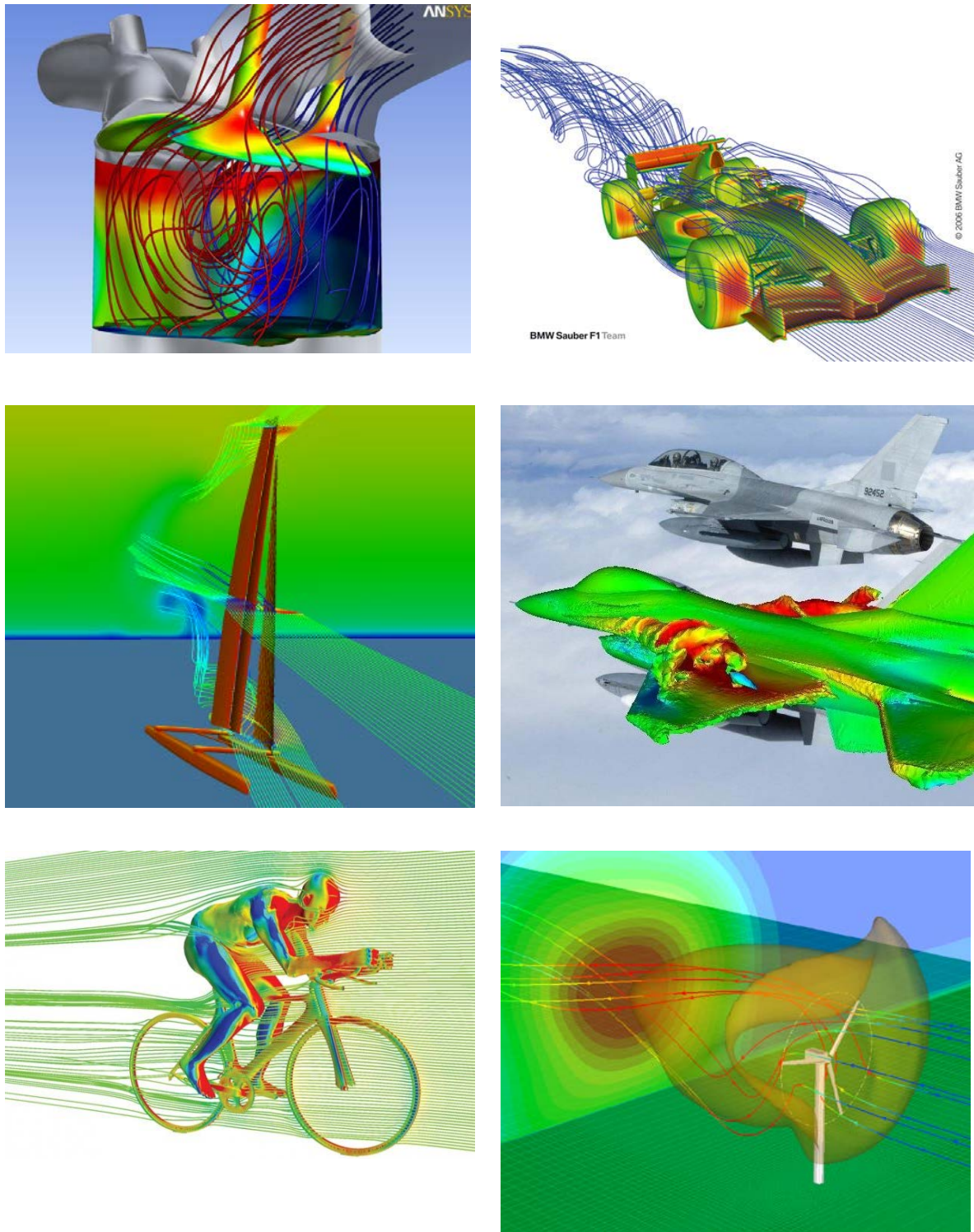


Figura 2.11: Diferentes ejemplos de aplicaciones CFD (www.directindustry.es, [BMW Sauber, www.BMW-Sauber.com](http://www.BMW-Sauber.com), www.dynamic-fluid-design.com, www.tecnicaF1.es, www.velominati.com, www.megajoule.pt).

El uso de estas técnicas supone una serie de ventajas como por ejemplo:

- ❖ Reducción sustancial de tiempos y costes en los nuevos diseños.
- ❖ Posibilidad de analizar sistemas o condiciones muy difíciles de simular experimentalmente: velocidades hipersónicas, temperaturas muy altas o bajas, movimientos relativos, etc.
- ❖ Capacidad de estudiar sistemas bajo condiciones peligrosas o más allá de sus condiciones límite de funcionamiento (por ejemplo un accidente)
- ❖ Nivel de detalle prácticamente ilimitado. Los métodos experimentales son tanto más caros cuanto mayor es el número de puntos de medida. Los programas CFD generan un gran volumen de resultados sin coste añadido.

Sin embargo no todo son ventajas a la hora de usar las técnicas CFD. En primer lugar no son técnicas baratas, a la inversión en material de computación (grandes ordenadores), hay que sumarle el gasto en licencias de programas informáticos, los cuales suelen ser especialmente caros. Si bien es cierto que son inversiones que se recuperan fácilmente debido a las ventajas mencionadas anteriormente.

Por otro lado, es muy importante la formación del personal encargado en manejar estos programas, debiendo tener un amplio conocimiento de dinámica de fluidos y de las capacidades y limitaciones de los programas utilizados. No siempre es posible obtener resultados lo suficientemente precisos, y es fácil cometer errores de bulto. Esto es debido a que es necesario simplificar el fenómeno para que hardware y software puedan llegar a abordarlo, de manera que el resultado será tanto más preciso cuanto más adecuadas hayan sido las hipótesis y simplificaciones realizadas (algo difícil de conseguir debido a las limitaciones de los modelos existentes para la turbulencia, flujo másico, combustión, etc.)

Para el desarrollo de técnicas CFD se utilizan distintos programas, comerciales o no. Todos ellos tienen en común la filosofía de trabajo. La metodología de estos programas consiste en seguir una serie de pasos:

- ❖ Especificar la **geometría** del problema, tanto del objeto o sistema a estudiar como de los contornos del dominio. La mayor complicación de este paso se da cuando se estudian casos tridimensionales. En cualquier caso es necesario comprender bien el problema a estudiar. Una buena simplificación o acotación del problema puede dar lugar a un volumen de control menor o más sencillo de mallar que resulte en un menor tiempo de computación pero que pueda concluir en idénticas conclusiones que con el modelo completo. Debido a esto este paso es crítico y condiciona el resto del proceso a seguir. No se trata de simular un caso exacto al real, puesto que esto puede ser muy costoso, o directamente imposible, como en el caso del estudio que trata la presente tesis, sino un modelo lo suficientemente significativo para el fenómeno que se está estudiando. En no pocas ocasiones podemos plantearnos el uso de un modelo bidimensional o un modelo axisimétrico en lugar de un realista pero complejo modelo tridimensional. El modelo además deberá prepararse para la fase de mallado, esto implica que la geometría debe ser lo más limpia posible. Con frecuencia ocurre que el modelo tridimensional se realiza en programas CAD externos al entorno del programa de simulación numérica, por lo general porque estos programas permiten modelar con mayor facilidad al estar diseñados justo para eso. Es importante verificar que en la exportación no se pierda información o que la geometría se dañe, lo que podría causar problemas posteriores en el mallado.

- ❖ Crear el **mallado** 2D o 3D (volúmenes) es decir, los puntos en los que van a ser calculada las variables. Consiste en la discretización espacial del dominio para calcular las mismas. Para realizar esto se crea una malla, y es muy importante determinar de qué tipo y que resolución tendrá. Con un mayor número de elementos tendremos una mayor precisión pero se ralentizará el cálculo. Habrá que buscar un compromiso entre estos dos factores así como decidir en qué zonas del modelo queremos tener un mayor número de elementos, es decir, una mayor precisión. Este paso es probablemente el más importante de cara al éxito de la simulación. En el caso del mallado para el método de volúmenes finitos, que es el caso de este trabajo, se discretiza el volumen a estudiar en un número finito de unidades fundamentales o

celdas, cada una de ellas asociada a un centroide y limitadas por un número de caras ancladas a su vez a una serie de vértices o nodos (J.M. Fernández, 2012). En función de cómo se distribuyen en el espacio estas celdas podemos distinguir entre dos tipos de mallado: estructurados y no estructurados. Mientras que en el mallado estructurado la posición de las celdas está perfectamente definida en el espacio unas junto a otras de manera que es posible situarlas por sus coordenadas cartesianas (normalmente serán cuadriláteros en 2D y hexaedros en 3D), en el mallado no estructurado no sigue ningún tipo de dirección preferente. Con el mallado no estructurado se consigue adaptar la malla a geometrías más complejas pero requerirá un mayor gasto computacional. Ha de tenerse en cuenta el tipo de flujo a resolver y las zonas de estudio principal del mismo antes de diseñar el mallado. Igualmente importante es la calidad del mallado, que se distribuya de la forma más regular posible en todo el dominio, evitando celdas muy deformadas.

- ❖ Imposición de las **condiciones de contorno**. Fijar algunos valores de variables en los límites del dominio (presión estática, presión total, velocidad o gradiente de dichas variables y de las de turbulencia según el modelo elegido).
- ❖ Introducción de las **condiciones iniciales**. Es necesario fijar un valor para todas las variables en todo el dominio para que el programa comience el proceso iterativo desde ese punto inicial.
- ❖ Especificación de las **propiedades del fluido**, como viscosidad, densidad, temperatura, presión, ... en función del tipo de problema que se esté tratando.
- ❖ Control de los **parámetros** que afectan a la resolución numérica del problema. Esta parte afecta a la forma de realizar los cálculos, es decir, el proceso iterativo.

Por último se analizan los resultados y se toman decisiones sobre el diseño del modelo (postproceso).

2.4. Técnicas de modelado y parametrizado

Es indudable que el avance informático de las últimas décadas ha supuesto una revolución para el mundo de la expresión gráfica y en especial para todo lo concerniente con la ingeniería gráfica. Hace no mucho era impensable imaginar el avance que supondría en el diseño industrial la aparición de programas de dibujo asistido por ordenador o CAD por sus siglas en inglés (Computer Aided Design) y sin embargo hoy ya son cosa del pasado.

El dibujo asistido por ordenador permite reproducir nuestras ideas de manera digital con mayor precisión y versatilidad que sobre el papel. Las primeras técnicas y métodos se remontan a 1960 y ya incluían algunas primitivas básicas bidimensionales a las que se fueron añadiendo nuevas entidades como las splines. Poco después se introdujeron las curvas bezier y nuevas aplicaciones 3D.

Al final de la década de los 60 ya se disponía de métodos gráficos para realizar mallas poligonales. Igualmente fueron apareciendo diferentes métodos para visualizar estas mallas como los métodos flat-shading (1970), gouraud-shading (1971) o phong-shading (1975) siendo los principales métodos utilizados hasta ahora (J.Monedero 2000). Durante la década de los 70 se desarrolló también el modelado libre o superficies esculpidas, apareciendo poco después las denominadas curvas nurbs (non-uniform rational b-splines).

El modelado de sólidos también se remonta a la década de los 60, pero tuvo una evolución más lenta que las técnicas descritas anteriormente. Hasta finales de los 70 no se comenzó a introducir estos métodos de representación tridimensional en software comercial. Actualmente los programas CAD disponen de una combinación de ambos sistemas. Es el caso de AutoCad, que incluye los módulos ACIS y AME.

Estos programas, aunque supusieron un gran avance en la edición de modelos tridimensionales, presentan limitaciones a la hora de modificar o interactuar con el modelo. Uno de los principales problemas que presentaban era la falta de recursos para modificar las superficies creadas, los volúmenes, o que dichas

modificaciones afecten a la relaciones entre las partes del modelo. Tampoco se daba una buena integración entre superficies y sólidos.

Con los métodos numéricos y la representación tridimensional se dio un paso importante para el desarrollo integral del producto de una manera digital, ahorrando costes en fases de prototipado, y en el caso de investigación, en fases de experimentación.

La aplicación de estas técnicas de modelado 3D en el mundo del diseño mecánico tuvo un éxito inmediato y el uso y mejoras de estas técnicas se extendió rápidamente. Cuando se habla de fabricación de elementos mecánicos se da la particularidad de diseñar elementos similares que comparten piezas o parte de la geometría, y en los que en muchas ocasiones sus diferencias sólo radican en distintas dimensiones de parte de su geometría. Es por ello que en este entorno es donde se empezó a gestar el diseño paramétrico.

Con el diseño paramétrico la filosofía cambia respecto al dibujo o diseño clásico. Con estas nuevas técnicas se trata de diseñar un proceso y no un resultado concreto, es decir se desarrollan una serie de relaciones matemáticas y geométricas, creando procesos y sistemas o algoritmos que permiten explorar más de un resultado según los criterios de diseño preestablecidos.

Podemos definir el diseño paramétrico como la resolución del problema de asignar la mejor combinación de valores posible a todos los parámetros necesarios para describir el objeto de diseño, es decir, dado un problema informal de diseño, plantear y resolver un problema computacional que determine los mejores valores de los parámetros del sistema. (S.A. Marrero 2008)

El diseño paramétrico en su sentido más amplio ha hecho apariciones en programas de diseño asistido por ordenador y en diferentes niveles. Es el caso por ejemplo de los bloques de Autocad, que permite insertar un modelo en el dibujo con una serie de parámetros cuyos valores se especifican en el momento de la inserción. Otros programas permiten hacer modificaciones sobre el diseño finalizado si este ha sido realizado con ciertas entidades del mismo. En cualquier caso, estos

avances no permitían trabajar con formas o elementos complejos y que presenten relaciones entre sus partes constituyentes.

El diseño paramétrico permite asociar características geométricas de elementos del modelo CAD empleado a variables o parámetros. Estos parámetros pueden tomar un valor numérico, conformar alguna restricción geométrica, relacionarse entre ellos, etc; de manera que el modelo CAD pasa a albergar una mayor cantidad de información que si hubiera sido concebido con las técnicas clásicas de modelado. Esta información adicional nos permite obtener varios modelos a partir del inicial con sólo modificar esos parámetros definidos previamente, sin tener que volver a modelar desde el principio, suponiendo un enorme ahorro en tiempo y costes. Igualmente, gracias a estas técnicas de modelado, no es necesario establecer desde un primer momento unas dimensiones o cotas definitivas, por lo que se le da una gran libertad al diseñador a la hora de concebir su producto.

Existen multitud de programas de software paramétrico. Entre los más utilizados están CATIA, CREO (anteriormente Pro-engineer), ANSYS Modeler, Autodesk Inventor, Solidworks, NX (Unigraphics), Solidedge, etc... Presentan diferencias en sus entornos de trabajo pero todos comparten la misma filosofía.

El origen y desarrollo de este tipo de software está relacionado con los procesos CAD/CAM (diseño y fabricación asistidos por ordenador). Como se ha comentado, dicha parametrización no se limita únicamente a definir una serie de dimensiones, siendo las restricciones geométricas igual o aún más importantes si cabe, ya que permiten, por ejemplo, que una parte del modelo sea siempre vertical, que dos superficies se mantengan siempre paralelas, o que dos puntos sean coincidentes. Las restricciones en el diseño asistido por ordenador se han ido introduciendo en los programas desde 1960 (J.Monedero, 2000). Estas restricciones están presentes por ejemplo en la edición de una polilínea, dónde los vértices de cada una de las líneas que la forman son siempre coincidentes. Cuando se permite al usuario tomar el control sobre estas restricciones y parámetros éste puede encontrarse con modelos con diferentes grados de libertad, modelos totalmente restringidos o sobre-restringidos. Un modelo sobre-restringido puede implicar una

incompatibilidad o contradicción en los parámetros o restricciones o una redundancia en alguna de ellas. Para que un modelo quede bien parametrizado lo ideal es conseguir que tras fijar las diferentes restricciones y parámetros dimensionales el modelo tenga cero grados de libertad.

Cuando se define un parámetro, no necesariamente tiene que tratarse de un valor numérico. Un parámetro del modelo puede ser una expresión que relacione otros parámetros previamente establecidos. Por ejemplo, se puede querer que dada la base de un tronco de cono, la superficie opuesta tenga un diámetro de dimensión la mitad del de la base. Es decir, si la base tiene un diámetro de 10 cm (dimensión que a su vez puede ser un parámetro modificable), la superficie opuesta tendrá, asignada automáticamente por el programa, un diámetro de 5 cm. Igualmente sería factible atribuir restricciones que supongan expresiones más complejas como por ejemplo condicionales del tipo: Si $d_0 < 5$ then $d_1 = 2$ else $d_1 = d_0 * 0,5$.

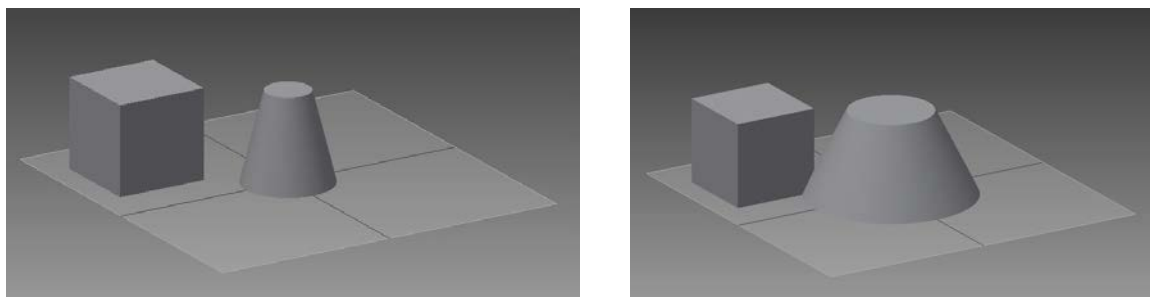


Figura 2.12: Ejemplo de modelo paramétrico. En el tronco de cono, $d_1 = d_0/2$ para valores de d_0 : 10 y 20 mm siendo d_0 el diámetro inferior y d_1 el diámetro superior.

En las primeras fases del proceso creativo, las restricciones de un modelo paramétrico pueden convertirse en un inconveniente cuando quieren hacerse cambios rápidos y directos sobre el modelo, por lo que se ha desarrollado un nuevo tipo de software de edición 3D denominado modelado directo (Direct modelling). Con este nuevo software es posible realizar modificaciones directamente sobre el modelo sin necesidad de actuar necesariamente sobre los parámetros del mismo, sus restricciones u operaciones precedentes. Y es que otra limitación del modelado

paramétrico es la dependencia jerárquica de las operaciones de modelado con respecto a sus precedentes. El software paramétrico por lo general es un sistema basado en la *historia* del modelo. En estos programas, cuando realizamos un cambio en una parte del modelo, es necesario recalcular todo el árbol de operaciones aplicando los nuevos parámetros del modelo. Por lo general el software de diseño paramétrico basado en la historia del modelo se basa en el uso de bocetos 2D desde los que definir operaciones tales como extrusiones, revoluciones o soleados, ya sea añadiendo o eliminando material. Estos bocetos y operaciones quedan almacenados en el sistema en el árbol de operaciones junto con el orden en el que se crearon permitiendo volver atrás a cualquier punto del árbol, de la cronología del proceso de modelado, y efectuar cualquier cambio. Realmente, lo que se produce con esto es un nuevo nivel de restricciones, esta vez entre operaciones. Por ejemplo, una operación puede basarse en un boceto 2D cuyo plano de edición sea la cara de un sólido realizado en una operación anterior. La modificación de la operación que generó el sólido en primer lugar, puede dar lugar a una superficie diferente a la que originó el boceto 2D de la siguiente operación, generando un resultado diferente también para esta segunda operación.

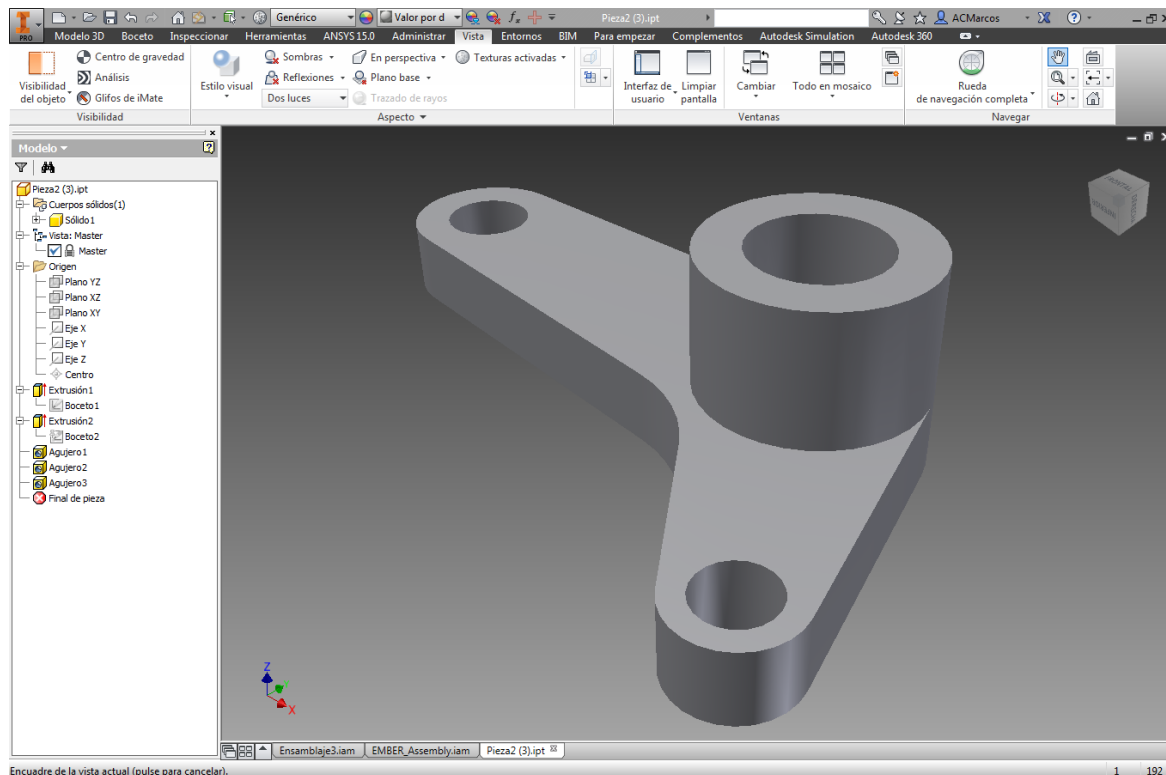


Figura 2.13: Detalle de modelo 3D y árbol de operaciones.

Gracias a las dependencias generadas en el árbol de proyecto, y las restricciones y parámetros utilizados en el modelo, se puede conseguir un gran control sobre las formas del modelo. De hecho, estos sistemas se han venido denominando como sistemas inteligentes debido a que tanto los bocetos 2D como las operaciones están construidas a base de reglas paramétricas, tal y como se ha descrito previamente.

Pero esto presenta un problema cuando el modelo es generado por un elevado número de operaciones, pues recalcularlo el árbol de operaciones tras un cambio, supone un elevado tiempo de cálculo. Igualmente, en el caso de modelos complejos, las modificaciones realizadas en algún punto del árbol de operaciones del mismo, bocetos u operaciones, si produjeran alguna incongruencia, podrían afectar al resto del modelo, resultando en un fallo de modelado a la hora de recalcularlo el árbol de operaciones.

En el software de modelado directo no existe esta lista de pasos u operaciones. Pueden modificarse caras del sólido directamente actuando sobre ellas o a través de los bocetos, no necesitando repasar la historia del modelo una vez hecha la modificación por lo que evita estos fallos potenciales.

Los programas de modelado directo se están volviendo muy populares porque con ellos es muy fácil crear modelos y modificarlos. Por ello la mayoría de empresas del sector están sacando al mercado software de modelado directo integrado en paquetes que incluyen igualmente el modelado paramétrico. Es el caso de Autodesk Inventor Fusion, PTC Creo Elements/Direct o ANSYS Spaceclaim, entre otros.

Más recientemente y gracias al aumento en las capacidades de cálculo de los ordenadores actuales, ha sido posible extender el uso de esta herramienta a otros campos como la edificación civil e industrial. En este ámbito la parametrización ha supuesto un avance por partida doble. Por un lado, permite obtener volúmenes más complejos y editables gracias a la aplicación de expresiones matemáticas a los parámetros que definen la geometría del edificio. Por otro lado permiten enriquecer el modelo arquitectónico convirtiéndolo en una auténtica base de datos gráfica. En este caso hablamos de modelado de información de edificios o Building Information Modeling por sus siglas en inglés (BIM). El dibujo paramétrico en este área ha permitido obtener modelos de edificios que en realidad constituyen una base de datos gráfica de la que obtener información de tipo y número de elementos, presupuestos, peso, etc... en un archivo único y fácilmente modificable, entre otras muchas ventajas.

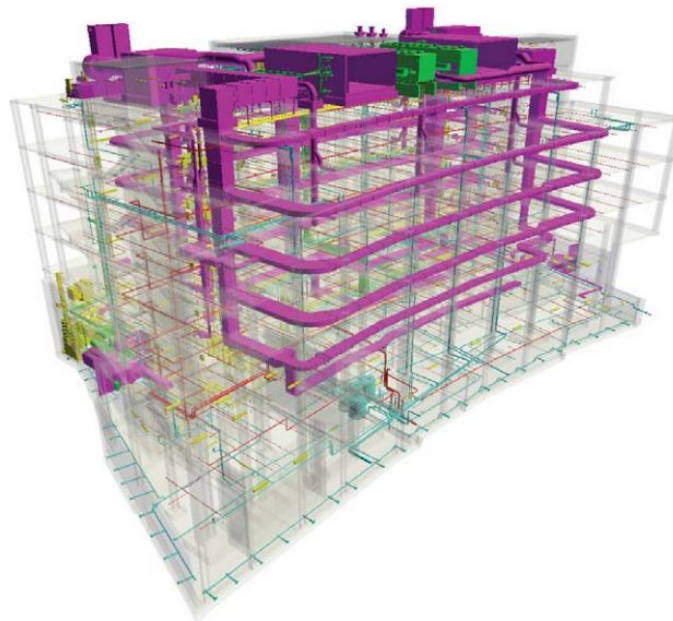


Figura 2.14: Ejemplo de modelo paramétrico y BIM. (solo3d.wordpress.com, web3d.com).

Con la aplicación de estas técnicas al mundo de la simulación numérica se abre un gran abanico de posibilidades. La mayoría de los programas informáticos de simulación permiten introducir estos parámetros en el diseño posibilitando la realización de simulaciones consecutivas para diferentes valores de los mismos denominados puntos de diseño. Esto permite evaluar cuál es la magnitud óptima para cada parámetro con sólo evaluar el resultado para cada punto de diseño predefinido.

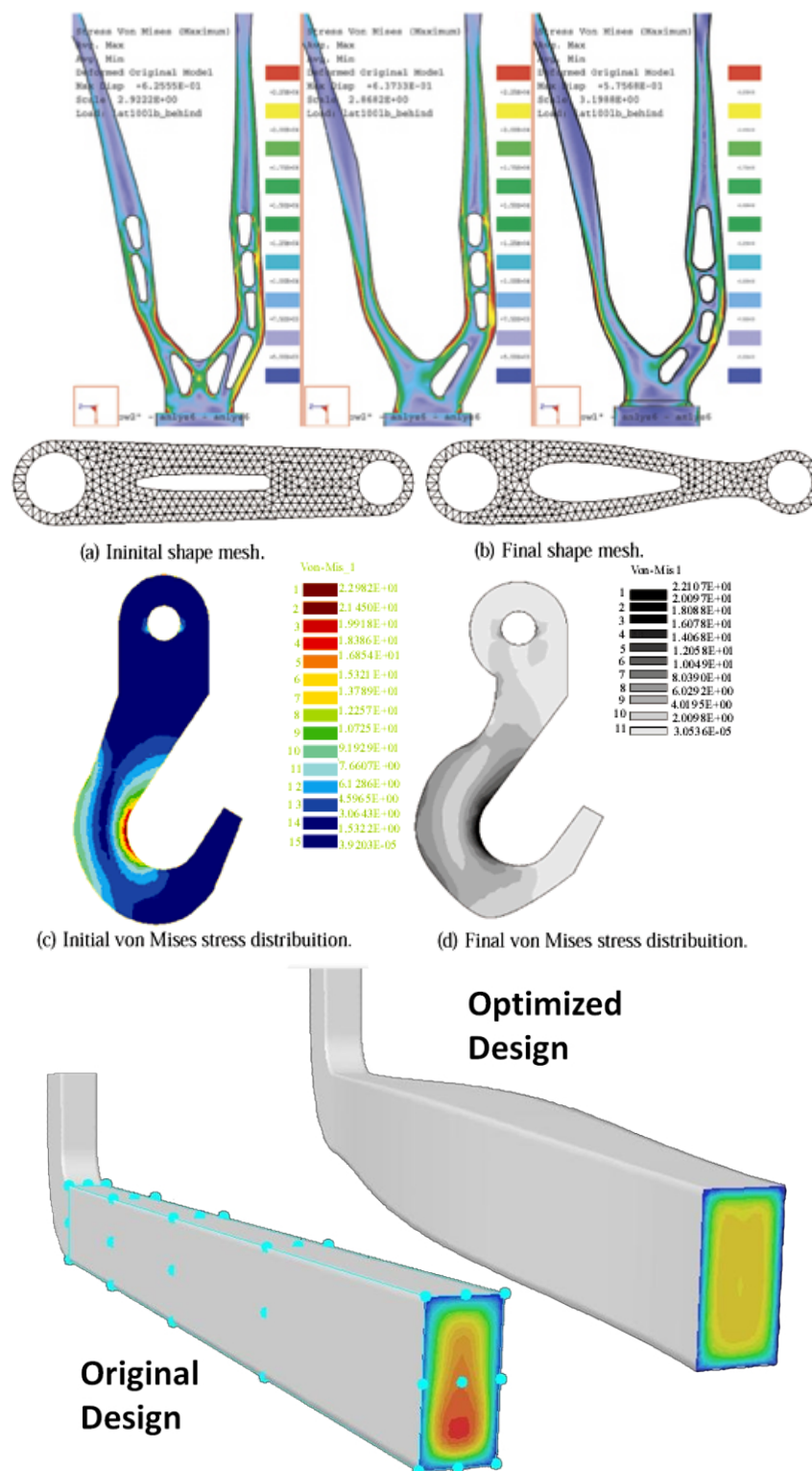


Figura 2.15: Ejemplos de optimización de piezas gracias al diseño paramétrico. (www.castellanosdesign.com, M.L.Bittencourt, ANSYS.com)

En esta tesis se aplica las técnicas de modelado paramétrico a un caso práctico de pulmón humano, con el que poder evaluar a posteriori resultados de otras investigaciones, enfermedades pulmonares, influencia de características fisionómicas particulares en el desarrollo del flujo de aire en el pulmón, etc.

Debido a la enorme complejidad del pulmón humano, tal y como se ha explicado en puntos anteriores, la parametrización de un modelo de estas características no es nada sencillo. En primer lugar hay que definir cuáles son los parámetros, ya sea dimensiones o características geométricas que permanecerán fijas a través de restricciones geométricas, y que otros son susceptibles de ser parametrizados e interesantes desde un punto de vista práctico.

El modelo completo de las vías aéreas, aún siendo viable desde el punto de vista del modelado, sería inútil desde el punto de vista de un estudio numérico puesto que no existen ordenadores con la suficiente capacidad de computación para poder simular el flujo de aire mediante técnicas CFD. El modelo presentado, como se verá en el capítulo 4, es una simplificación, lo que no evita que se trate de un modelo muy complejo con gran cantidad de operaciones y parámetros.

2.5. Conclusiones

En el presente capítulo se han presentado las principales características fisonómicas de las vías aéreas humanas. Con ello se ha pretendido transmitir la enorme complejidad que supone el árbol bronquial y que es uno de las principales retos al que hacer frente a la hora de abordar un modelo numérico de las vías aéreas.

Una de las principales ventajas de disponer de un modelo numérico realista del pulmón humano es el estudio de las patologías relacionadas con las disfunciones en el paso del aire por las vías aéreas. Es por lo que este capítulo también recoge los principios generales de estas patologías. Del estudio del efecto de las mismas se tratará de modificar los parámetros del modelo 3D para su simulación.

Igualmente se trata de los procedimientos experimentales para el diagnóstico de estas enfermedades puesto que un estudio de este tipo puede ayudar a interpretar aún mejor los resultados e igualmente las pruebas experimentales ayudarían a validar el modelo propuesto.

Para la mejor comprensión de los métodos empleados en el desarrollo de este trabajo se ha incluido en el presente capítulo los principios generales del trabajo con técnicas de dinámica de fluidos computacional, ya que su filosofía de trabajo condiciona fuertemente la edición del modelo 3D a emplear. De este estudio se concluye la vital importancia que supone la fase de modelado en el proceso general de un estudio CFD.

El presente trabajo no consiste únicamente en la edición de un nuevo modelo numérico para las vías aéreas sino que pretende poner a disposición de nuevos estudios numéricos mediante técnicas CFD un modelo paramétrico que albergue la posibilidad de poder editar las variables más importantes de su geometría. Es por eso que en este capítulo se recogen igualmente los principios del dibujo paramétrico que es la base en la que se sustenta la edición de este nuevo modelo. Para la edición del pulmón se ha elegido un programa de dibujo paramétrico con un sistema basado en la historia del modelo con la ventaja de un control absoluto sobre la geometría del modelo a pesar de un tiempo mayor de recálculo del modelo tras la modificación de los parámetros debido a la complejidad que presentan las vías aéreas.

3. ESTADO DEL ARTE

3. ESTADO DEL ARTE

Descripción de los trabajos de otros investigadores que intentan modelar la geometría y el funcionamiento de las vías aéreas y que han servido de punto de partida para el presente trabajo.

3.1. Estudios anteriores

La descripción de la geometría del pulmón humano es una tarea complicada dada la complicidad de su morfología. Las vías aéreas pulmonares humanas están comprendidas por repetidas bifurcaciones dicotómicas dando como resultado una red de ramas de una complejidad significativa. Las redes de flujo de múltiples ramas geométricamente complejas son comunes en la naturaleza debido a su efectividad a la hora de distribuir un flujo central sobre una gran área. Las conducciones en el interior de las hojas de las plantas, la forma de los árboles o el curso de los ríos pueden ser ejemplos de estas formas geométricas denominadas fractales.

Para este estudio la herramienta principal utilizada es la dinámica de fluidos computacional o CFD (Computational Fluid Dynamics).

En lo relativo a estudios experimentales, las simulaciones computacionales son métodos económicos no invasivos para obtener datos del flujo en el pulmón humano en investigación y para propósitos clínicos. Las simulaciones CFD tridimensionales permiten información detallada para estudiar las impedancias, distribuciones de flujo másico, deposición local de partículas, y proporcionan un medio para examinar los efectos de condiciones anormales o patológicas.

Se ha probado en los últimos años que las técnicas CFD son una herramienta viable para la simulación predictiva de estos sistemas y han sido usadas de forma extensiva para examinarlos en detalle y proporcionar información sobre su función mecánica y/o fisiológica. Sin embargo, la gran magnitud de estos sistemas es un gran desafío asociado a las simulaciones CFD. Una descripción normal del árbol bronquial incluye varios millones de tramos bronquiales lo que supone que para

estudiar el pulmón de forma completa habría que manejar un tamaño estimado de cientos de billones de elementos.

Por tanto, la completa resolución del flujo bajo simulaciones CFD está lejos de las actuales y próximas generaciones de computadoras. Es por eso que las simulaciones CFD están siendo limitadas a relativamente pequeñas subsecciones de la geometría del pulmón, usando determinadas aproximaciones como ignorar el flujo en las vías aéreas más bajas o aproximándolo. Este tipo de limitaciones se dan del mismo modo al estudiar el sistema circulatorio humano.

La primera dificultad que nos encontramos es por tanto la descripción de la geometría. Uno de los modelos de geometría más usado es el conocido como modelo de Weibel (1963) que será utilizado en parte en este estudio. El modelo presenta el árbol bronquial como una sucesión de divisiones dicotómicas regulares de cada rama principal, esto es que cada rama se divide en cada generación en otras dos. A este modelo lo denominó Modelo A. El modelo completo se representa por 24 generaciones (siendo la tráquea la generación 0). Según este modelo el número de conductos aumenta exponencialmente. De esta forma habría una vía aérea de orden 0 ($2^0=1$), 2 vías de orden 1 ($2^1=2$), 4 de orden 2 ($2^2=4$), y por tanto 2^{24} vías de orden 24. Las ramificaciones hasta la generación 16 constituyen las vías aéreas conductoras mientras que a partir de ahí, estando ya más o menos alveoladas, se denomina zona transitoria hasta la generación 19 y zona respiratoria desde ahí hasta el final. Cada rama se considera un cilindro de diámetro constante.

Weibel plantea una modificación sobre este modelo, el Modelo B, que se trata de un modelo dicotómico irregular que intenta explicar las irregularidades encontradas en el pulmón frente al modelo simétrico, a través de la aplicación de factores en función de la distancia a la generación 0, en este caso la tráquea.

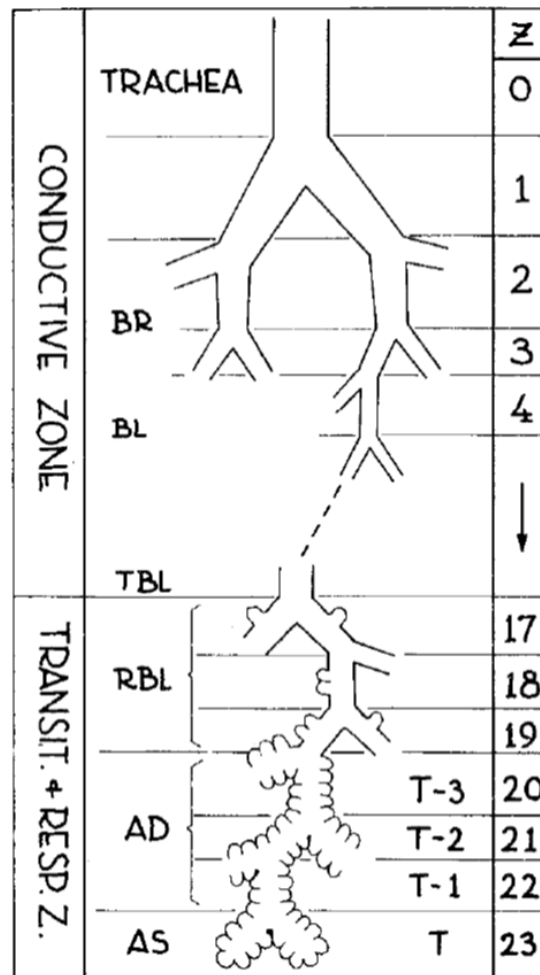


Figura 3.1: Generaciones y zonas del pulmón. (Weibel 1963).

Además del modelo simétrico de Weibel, se han ido desarrollando otros modelos. Destaca el modelo asimétrico de Horsfield y Cumming (1968) en el que, a diferencia del modelo de Weibel, se estudia la asimetría de las vías aéreas tanto para diámetros como para ángulos entre ramas. Para el estudio se partió de dos moldes de pulmones humanos. Se utilizan cuatro patrones diferentes de bifurcación para simular diferentes zonas del árbol traqueobronquial humano consiguiendo un modelo más realista que el de Weibel. Este mismo modelo fue utilizado por Martonen (1983 y 1985) para estudiar la deposición de partículas en los pulmones.

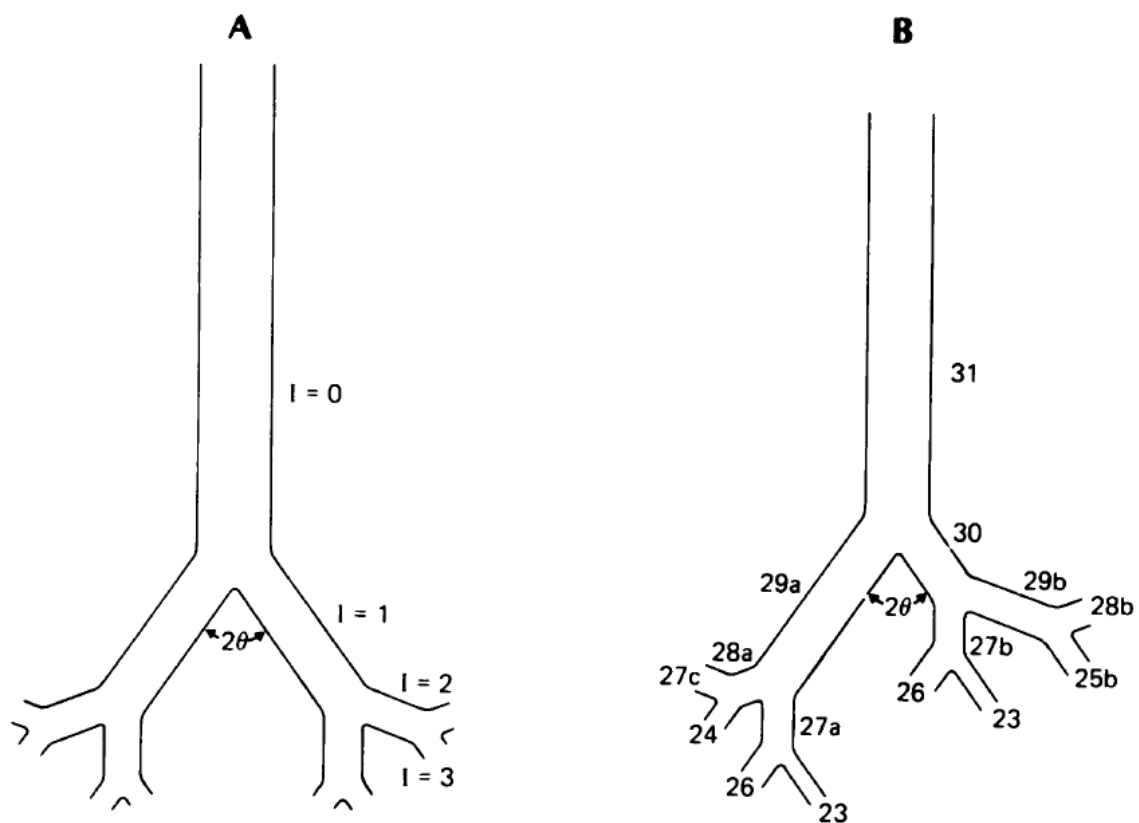


Figura 3.2: Diferencias entre un modelo de Weibel y otro de Horsfield. (Martonen 1985).

Raabe (1976) propuso un modelo físico de las vías aéreas respiratorias para describir, medir y entender la deposición local de diferentes tamaños de partículas en los tractos respiratorios de hombres y animales. Para tomar las medidas se usaron moldes plásticos del pulmón humano desde la tráquea hasta los bronquios terminales, así como de otras especies animales como el perro, la rata y el hamster. Se propuso un modelo de pulmón cuyos parámetros se estimaron a partir de las mediciones realizadas. El modelo consistió en describir las ramas como una principal que se bifurca en dos segmentos controlados por los siguientes parámetros: La longitud del segmento principal L , diámetro del mismo d , ángulo del segmento principal en la dirección de la gravedad ϕ y el ángulo de cada bifurcación sobre la dirección de la rama principal Θ . La longitud de cada segmento se mide entre los puntos centrales de una bifurcación y la siguiente.

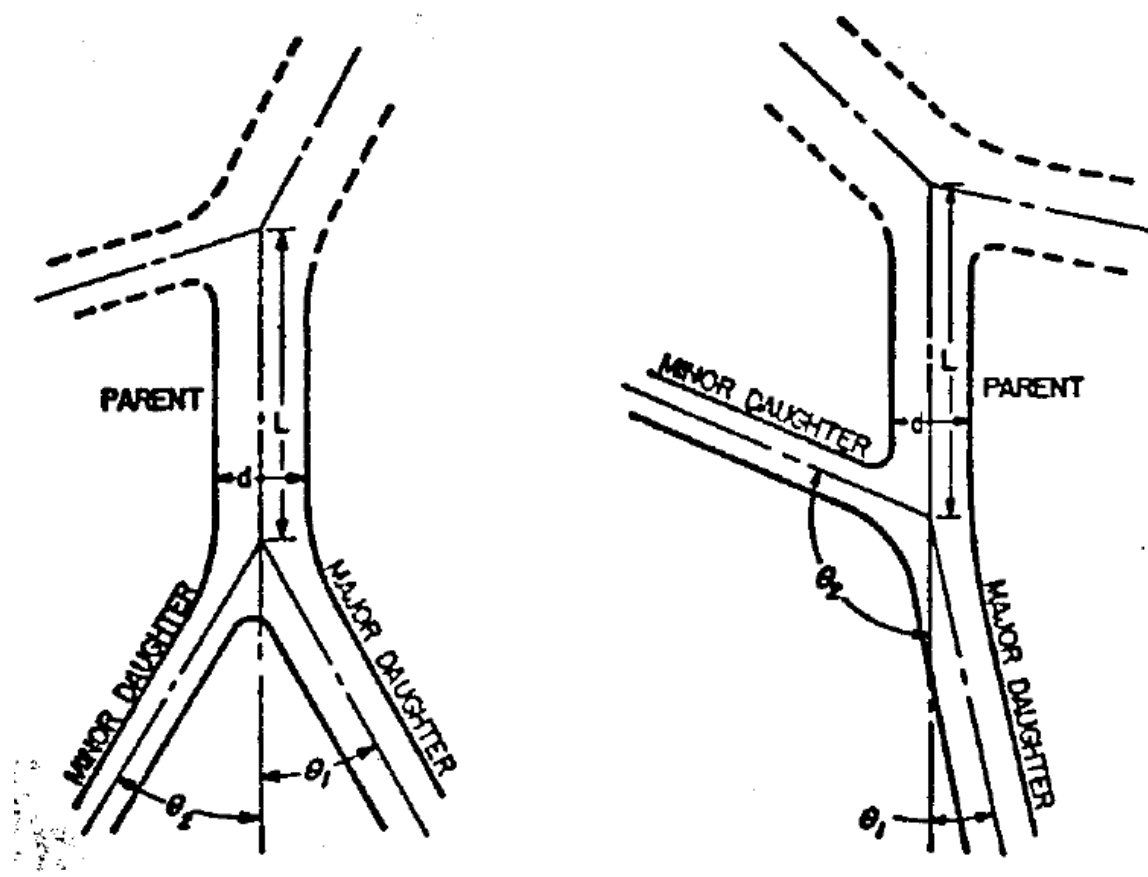


Figura 3.3: Modelo de pulmón de Raabe (1976).

Los diámetros de cada segmento se consideran constantes y se obtuvieron como el diámetro medio de la longitud total obtenido en las mediciones experimentales. En aquellas secciones donde no se obtuvo una sección circular se calculó el diámetro hidráulico. Para la designación de cada rama se utilizó un sistema binario, usando los dígitos 1 y 2 en lugar de 0 y 1, con el objetivo de poder conocer a qué parte del pulmón pertenece cada segmento a partir de su identificación. El orden de numeración de cada rama atendía en primer lugar a la generación, y en cada bifurcación se nombró primero a la rama de mayor diámetro y en caso de igual diámetro a la de mayor longitud.

10, y de longitud de 1.2 a 1.4 de la generación 7 a la 12. Las dimensiones obtenidas de esta forma corresponden a un pulmón de 4800 cm^3 , lo que suponen tres cuartos de su capacidad total.

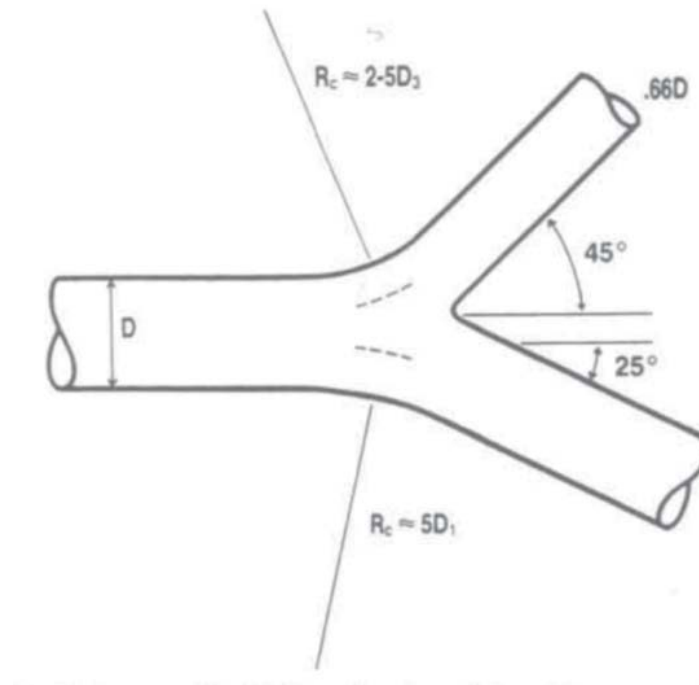


Figura 3.5: Ejemplo de bifurcación asimétrica asumida en el modelo de Hammersley y Olson (1992).

Hegedüs et al. (2004) dieron una detallada descripción matemática de una morfología realística de las vías aéreas para las primeras 5 generaciones. También se presentaron modelos similares de alta resolución por Sauret et al (1999), Schmidt et al. (2004) y otros. De la misma forma, Kitaoka et al. (1999) y Tawhai y Burrowes (2003) propusieron geometrías para las vías aéreas inferiores a través de una precisa descripción por aproximaciones logarítmicas.

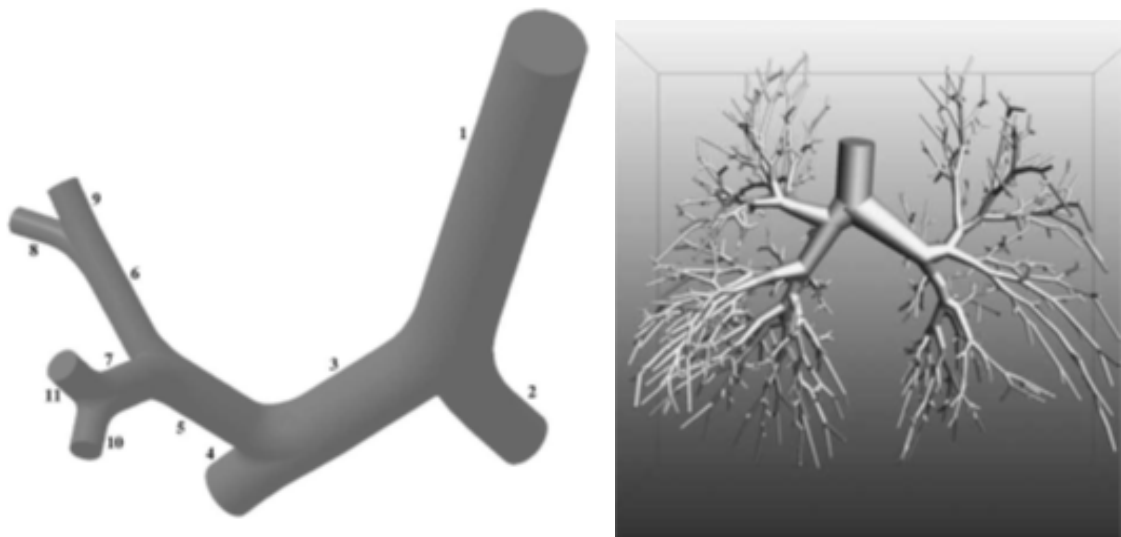


Figura 3.6: Modelos asimétricos de Hegedüs et al. (2004) y Schmidt et al. (2004).

Uno de los problemas que queda por resolver en los modelos de Weibel y Horsfield es que no incluyen información sobre cómo se ordena la estructura de las vías aéreas en el espacio. Kitaoka et al. (1999) propuso un modelo tridimensional de las vías aéreas respiratorias usando un algoritmo que genera el sistema de conductos basándose en dos principios principales:

- 1) la cantidad de fluido que reparte cada rama es proporcional al volumen de la región a la que lo suministra, y
- 2) las ramas se reparten homogéneamente ocupando el espacio del órgano.

Estos dos principios gobiernan la propagación de las ramas en función de las propiedades de la rama principal y la región que suministra. Para ello se definen nueve reglas básicas y cuatro complementarias. Especificando el contorno del órgano y la posición de la primera rama, el algoritmo crea sucesivamente la geometría.

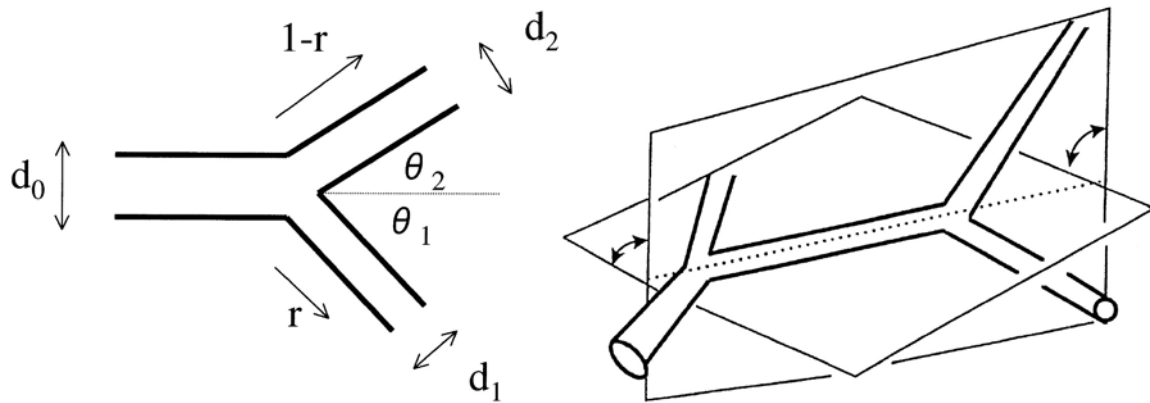


Figura 3.7: Algunas de las reglas de la geometría de Kitaoka (1999).

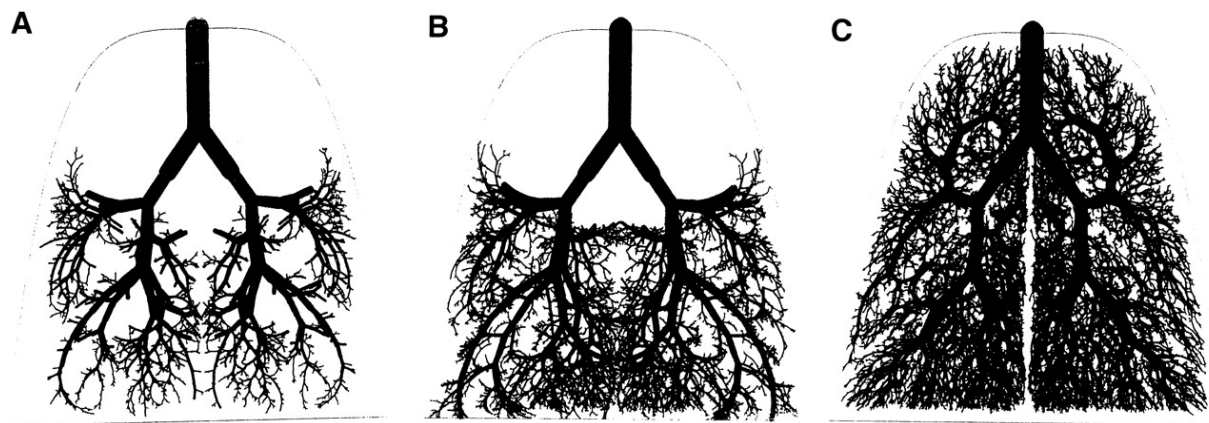


Figura 3.8: Resultado de los algoritmos de Kitaoka (1999) para diferentes grupos de reglas.

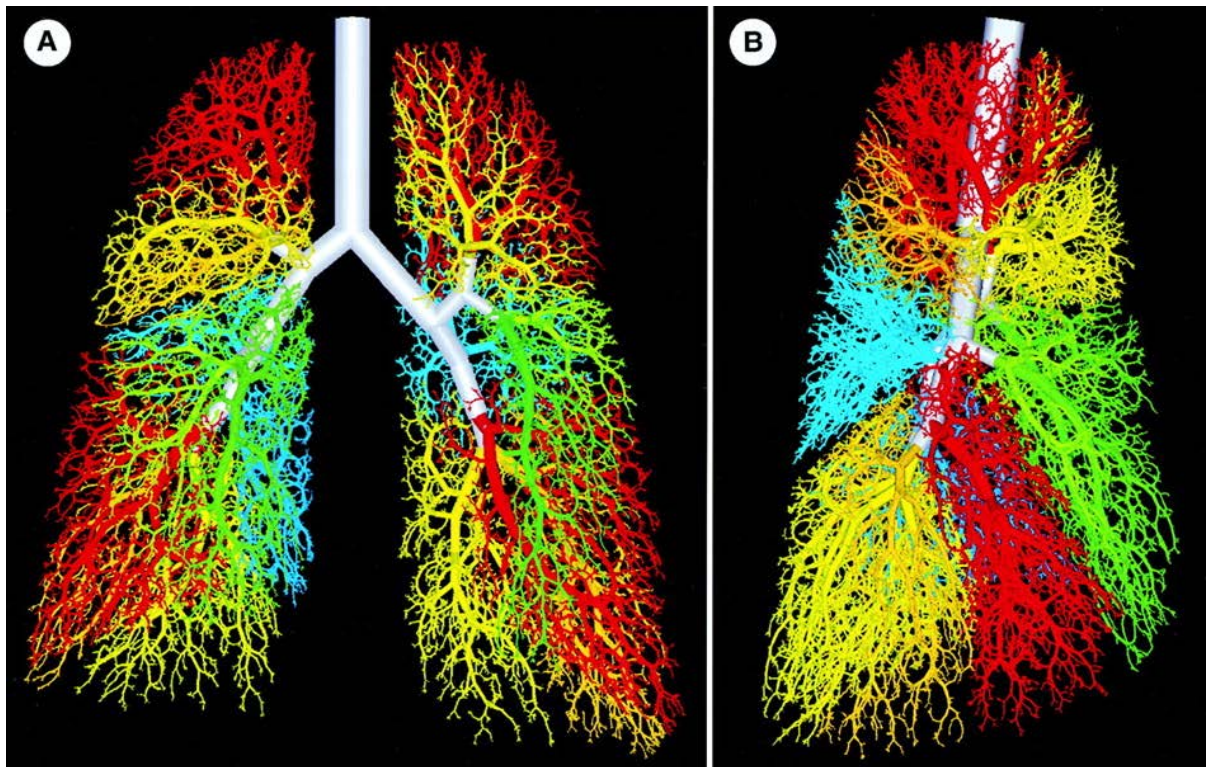


Figura 3.9: Resultado final de la aplicación del modelo de Kitaoka (1999).

Las nueve reglas son:

Regla 1: La ramificación es dicotómica, tal como se considera en el modelo de Weibel.

Regla 2: La rama principal y las dos secundarias descansan sobre el mismo plano.

Regla 3: El caudal se conserva tras la bifurcación. Es decir, la suma del flujo en las ramas secundarias es igual al flujo en la principal.

Regla 4: La región suministrada por la rama principal se divide en dos regiones secundarias divididas por un plano que es perpendicular al plano de la bifurcación. Para esta regla se ideó otra suplementaria para corregir el esquema de la división del espacio cuando la forma de la región lo requiriese.

Regla 5: El flujo principal se divide proporcionalmente según los volúmenes secundarios a los que accede. Es decir, la relación entre los flujos será igual a la relación entre los volúmenes

Regla 6: Los diámetros de las ramas y los ángulos de bifurcación están determinados por las siguientes ecuaciones:

$$a. d_0^n = d_1^n + d_2^n$$

$$b. \cos\theta_1 = \frac{1+r^{4/n}-(1-r)^{4/n}}{2r^{2/n}}, \cos\theta_2 = \frac{1+(1-r)^{4/n}-r^{4/n}}{2(1-r)^{2/n}}$$

donde n es una constante y r es la relación de división de flujo ($0 \leq r \leq 0.5$)

Para esta regla también existe una regla suplementaria que la modifica en función de la forma de la región a la que se suministra.

Regla 7: La longitud de cada rama secundaria es tres veces su diámetro. Como en la anterior, existe una regla suplementaria.

Regla 8: Cada plano de bifurcación es perpendicular al plano de bifurcación anterior aunque de nuevo una regla suplementaria puede modificar esta norma cuando deba adaptarse a una determinada región.

Regla 9: El proceso de generación de las ramas termina en cuanto el caudal alcance un umbral específico o cuando la rama se extienda fuera de su propia región.

Algunas de las reglas comentadas han sido adaptadas al modelo paramétrico objeto de este trabajo como se verá más adelante.

Por otro lado, se han documentado numerosas simulaciones del flujo de aire en los bronquios tanto para representaciones simétricas ideales como para representaciones asimétricas de partes del árbol bronquial [Zhang et al. (2001-2002-2004-2005), Liu et al. (2002), Longest et al. (2007), Soni et al. (2013)]. Varios de estos esfuerzos recogidos en la literatura han comparado las diferencias entre los patrones de deposición de partículas en geometrías idealizadas y en geometrías realistas generadas por técnicas de imagen médicas.

Algunos estudios actuales que usan morfologías realistas de las vías aéreas pulmonares emplean escáneres CT (Computed Tomography), tomografía computerizada, y técnicas MRI (Magnetic Resonance Imaging), imagen de resonancia magnética, [Sera et al. (2003), Burton et al. (2004)], las cuales, aunque dan una geometría más realista, no pueden proporcionar definiciones de la geometría más allá de 7-9 generaciones.

La tomografía computerizada es una técnica de imagen médica que utiliza rayos X para obtener cortes o secciones de objetos anatómicos con fines diagnósticos (Wikipedia). Con las técnicas CT pueden obtenerse imágenes de gran nitidez de una manera rápida, sin embargo es necesaria la exposición del paciente a rayos X. Los rayos X inciden sobre el objeto que se estudia de manera que aquella radiación que no se absorbe es recogida por los detectores. Un cambio continuo y controlado de la posición del emisor en torno al objeto permite obtener la imagen final que será procesada por el ordenador, obteniendo así el primer corte. Una vez obtenido, la mesa dónde se sitúa el objeto avanza y el ciclo comienza de nuevo para obtener el segundo corte a la distancia que se haya fijado. Los ordenadores actuales permiten ya obtener reconstrucciones 3D a partir de estos cortes.

Sera et al. (2003) desarrolló un método en dos pasos para poder visualizar con detalle la estructura de las vías aéreas humanas más pequeñas en tres dimensiones. Para ello no se recurrió a la deshidratación ni fijación del modelo. El método consiste en teñir el tejido del pulmón con una solución radiopaca y luego visualizar esos tejido mediante técnicas CT para después analizar la morfología del árbol bronquial, diámetros, longitudes y ángulos usando un algoritmo para detectar los contornos y la línea media.

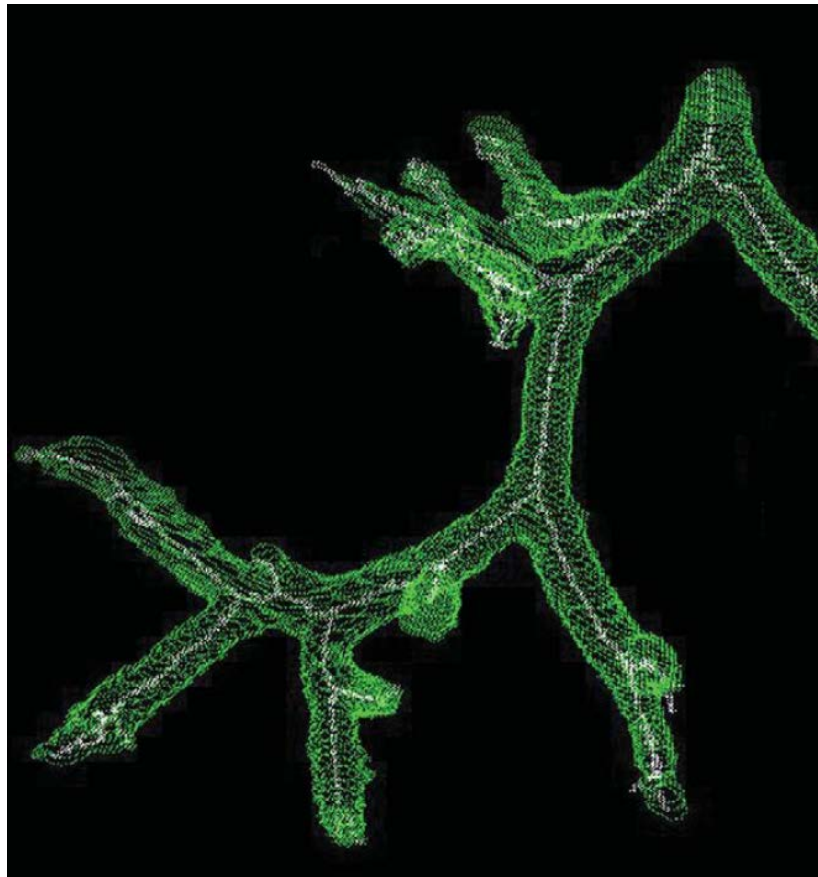


Figura 3.10: Modelo obtenido por Sera et al. (2003) donde puede apreciarse los cortes obtenidos en verde así como la línea media generada por el algoritmo en blanco.

La interpretación de resultados experimentales obtenidos de imágenes médicas no es sencilla. Como ya se ha comentado anteriormente, existen diferencias geométricas en las vías aéreas entre diferentes especies, pero también entre diferentes individuos de una misma especie. Tawhai et al. (2004) realizaron un estudio para determinar lo significativo de estas diferencias estudiando el eje curvilíneo central de las vías aéreas de humanos y ovejas usando datos detallados obtenidos de escáneres CT. Las imágenes se procesaron para obtener los modelos mediante un algoritmo que determina el eje central obteniendo una detallada descripción de los pulmones y lóbulos estudiados. El objetivo de este estudio fue obtener estos datos anatómicos y compararlos con los de estudios anteriores (en el caso de árbol bronquial ovino, disponer por primera vez de esos datos). Finalmente,

a partir del modelo se pretenden realizar mallas computacionales que permitan realizar simulaciones.

Burton et al. (2004) realizaron una descripción matemática de la morfología de los pulmones con el objetivo de analizar el depósito de aerosoles inhalados mediante la generación del contorno de las vías aéreas respiratorias a partir de imágenes de resonancia magnética.

La imagen por resonancia magnética (IRM), también es conocida como tomografía por resonancia magnética (TRM) es otra técnica no invasiva que utiliza la resonancia magnética nuclear para obtener imágenes, tras un postproceso con ordenadores, del interior de objetos. En medicina es utilizada para observar alteraciones en tejidos, pudiendo detectar cáncer y otras patologías. A diferencia de la TC no usa radiación ionizante sino campos magnéticos para alinear la magnetización nuclear de núcleos de hidrógenos del agua en el cuerpo. Los campos de radiofrecuencia se usan para alterar sistemáticamente el alineamiento de esa magnetización, causando que los núcleos de hidrógeno produzcan un campo magnético detectable por el escáner. Esa señal se manipula para crear campos magnéticos adicionales y así construir la imagen del cuerpo. (Wikipedia).

El objetivo de Burton et al. (2004) no fué otro que el utilizar estas técnicas para tener una base sobre la que crear modelos anatómicamente realistas de la red de vías aéreas humanas. Para ello se utilizó un software de visualización y análisis de datos para reconstruir el volumen del pulmón a partir de una serie de imágenes de resonancia magnética recogidas en diferentes localizaciones verticales del pulmón que van desde el vértice hasta la base del mismo.



Figura 3.11: Modelo de Burton et al. (2004) realizado a través de técnicas MRI.

Ertbruggen et al. (2005) simularon el flujo inspiratorio tridimensional estacionario para un modelo que comenzaba en la tráquea y terminaba en la séptima generación de las vías aéreas. Su modelo puede ser entendido como un método híbrido entre los datos de Horsfield y Cumming (1968), para definir las características generacionales, y las técnicas de imagen médicas que proporcionan orientaciones locales de las ramas.

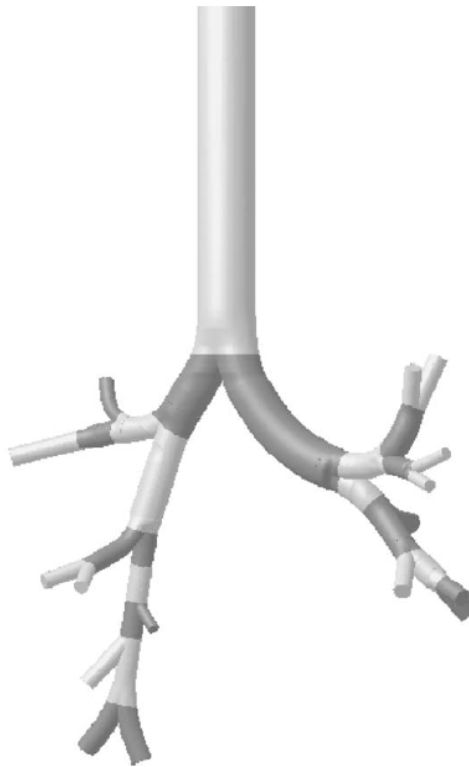


Figura 3.12: Modelo de Eartbruggen et al. (2005).

Algunos estudios han demostrado la inherente complejidad de la dinámica del flujo en el pulmón por su sensibilidad a cambios sobre un caso estándar o a simples diferencias de morfología del ramado para una inspiración estacionaria.

Zhang y Kleinstreuer (2004) desarrollaron simulaciones CFD en un modelo simétrico de 4 generaciones y encontraron que las estructuras del flujo alcanzadas durante la espiración eran más complicadas que las alcanzadas en la inspiración. También encontraron que el típico flujo no estacionario de una respiración normal conducía a diferentes características de flujo de las del caso estacionario, y que esa diferencia era mayor durante la ventilación de alta frecuencia.

Guan y Martonen (2000) demostraron de forma clara, usando un modelo simple basado en la morfología de Horsfield-Cumming, que el flujo en las vías aéreas superiores del pulmón no está completamente desarrollado. Los autores usaron un análisis dimensional para concluir que es poco probable que el completo

desarrollo del flujo se alcance en alguna de las vías aéreas del pulmón, sugiriendo que un modelo axisimétrico o 1D es inadecuado incluso para las más pequeñas vías aéreas. Un modelo simétrico hasta la cuarta generación fue usado recientemente por Luo et al. (2007) para investigar los efectos de EPOC (enfermedades pulmonares obstructivas crónicas) en la deposición de partículas en las vías respiratorias altas. Los resultados mostraron influencias significativas en la eficiencia de la deposición de partículas dentro y aguas debajo de las vías respiratorias obstruidas. Yang et al.(2006), previamente examinaron modelos de vías respiratorias de 3 generaciones para casos sanos y con EPOC y encontraron que el perfil de velocidad del flujo de entrada en los segmentos individuales tiene un efecto sustancial en los patrones del flujo, deposición y caída de presión, resaltando la importancia del acoplamiento preciso entre las regiones de flujo aguas arriba y abajo.

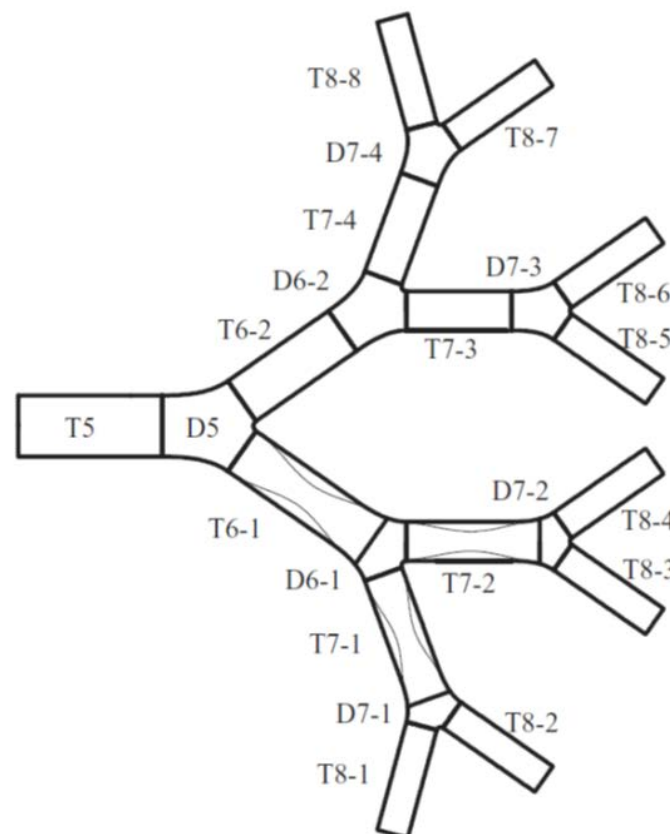


Figura 3.13: Vista esquemática del modelo computacional de Luo et al. (2007).

Muchos estudios CFD han intentado simular el flujo en toda la zona conductiva o incluso en el pulmón completo. Cuatro de estos notables intentos son las simulaciones secuenciales de Nowak et al. (2003) y Zhang et al.(2008), el modelo híbrido CFD/1D de Ma y Lutchen (2006), y el modelo de 17 generaciones de Gemci et al. (2008).

Nowak et al. (2003) desarrollaron una serie de simulaciones en segmentos de 3 generaciones progresivamente más pequeñas para las que la condición de entrada aplicada a cada sección fue obtenida de la simulación previa en la sección mayor. Para cerrar el modelo, las condiciones de contorno de salida en cada sección deben ser descritas a priori. Se introdujeron ángulos de 60° para las bifurcaciones y de 90° entre los planos que las contienen. Los autores concluyen que una condición de contorno de presión constante era inapropiada, pero que una condición de flujo másico constante (en la que el flujo másico se divide por igual entre todas las salidas) resultaba en un error relativamente pequeño. El estudio sólo se empleó para simular el ciclo de inhalación. Esta conclusión servía para esta simple geometría simétrica del estudio con 90 grados entre ramas, pero este enfoque produce resultados no realistas en geometrías físicamente más reales y precisas de modelos de vías aéreas. (Soni et al. (2013)).

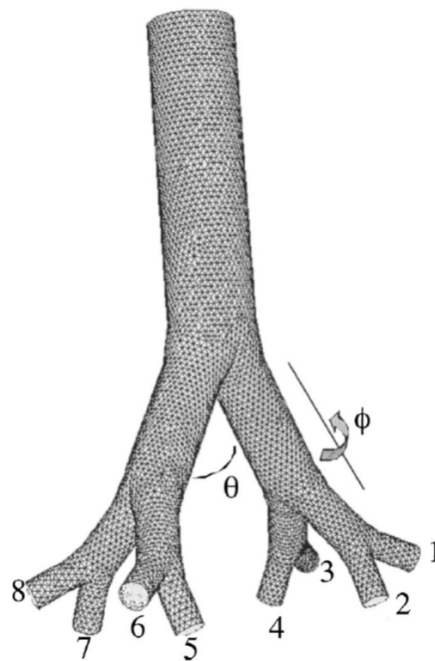


Figura 3.14: Vista del modelo usado por Nowak et al. (2003).

Zhang et al. (2008) documentaron recientemente un método secuencial similar para la predicción de deposición de nanopartículas a lo largo de 16 generaciones. En contraste con Nowak et al. (2003), se usó una condición de contorno de presión constante a la salida para cada subsección de 3 generaciones. Para ambos estudios, el método de solución secuencial no permitió un completo acoplamiento simultáneo del flujo en el pulmón a todas las escalas.

El modelo híbrido de Ma y Lutchen (2006) combinaba simulaciones de las vías aéreas superiores hasta la generación 6 con un modelo de líneas de transmisión 1D de las vías aéreas a pequeña escala. Sus resultados mostraban una buena predicción de la impedancia general en los pulmones cuando se compara con datos experimentales de pulmones sanos con frecuencias de respiración superiores a 8 Hz. No se incluyó en el estudio una investigación detallada del flujo a pequeña escala y la deposición de partículas.

Gemci et al. (2008) presentaron recientemente una simulación de 17 generaciones del pulmón humano basada en el modelo anatómico de Schmidt et al.

(2004). La geometría fue solo resuelta parcialmente, conteniendo 1453 bronquios por los 2^{17} de un modelo completamente resuelto. A diferencia de Ma y Lutchen (2006), los autores aplicaron una condición de presión constante igual en todas las salidas. La caída de presión en toda la geometría obtenida de las simulaciones fue un 33% menor que la medida por Hyatt y Wilcox (1963). Debe tenerse en cuenta que el mallado contenía sólo 6.7 millones de celdas. Sin embargo, el estudio representa un intento importante de representar el flujo en grandes secciones del árbol bronquiopulmonar usando simulaciones CFD 3D en un reducido número de trayectorias de flujo resueltas. En ese sentido la metodología presentada por Walters et al. (2010) tiene mucho en común con el enfoque adoptado en Gemci et al (2008).

Puesto que el flujo en el pulmón es altamente complejo, sensible a los detalles de las características anatómicas y a las tasas de ventilación, y fuertemente acoplado en todas las escalas, es deseable desarrollar simulaciones CFD que proporcionen verdaderas resoluciones multiescala y simultáneas de la red de flujo al completo. Este enfoque elimina la necesidad de modelos de orden reducido o empíricos. Una solución es confiar en que los sistemas de computación sean lo suficientemente grandes y rápidos para desarrollar simulaciones completamente deterministas de la geometría pulmonar al completo. Asumiendo que la simulación de 8 generaciones es representativa de la actual capacidad (la mayoría de los estudios han usado geometrías más pequeñas) y que la ley de Moore mantiene que la potencia de computación necesaria para simular el pulmón al completo para una investigación práctica y para aplicaciones clínicas tardará aún 30 años más, Walters et al. (2010) presentaron una metodología alternativa con la intención de abordar este retraso.

El nuevo método presentado consta de tres elementos: una descripción sistemática y estadística de la geometría y características de la ramificación (morfología); una selección de un conjunto de distintas líneas representativas del flujo para ser incluidas en la simulación; y aplicación de condiciones de contorno físicamente realistas a los flujos no resueltos en salidas y entradas. El método se basa en un número finito de caminos fluidicos completamente resueltos para

trasladar los resultados a una descripción del modelo completo. Eso supone una reducción notable en costes computacionales.

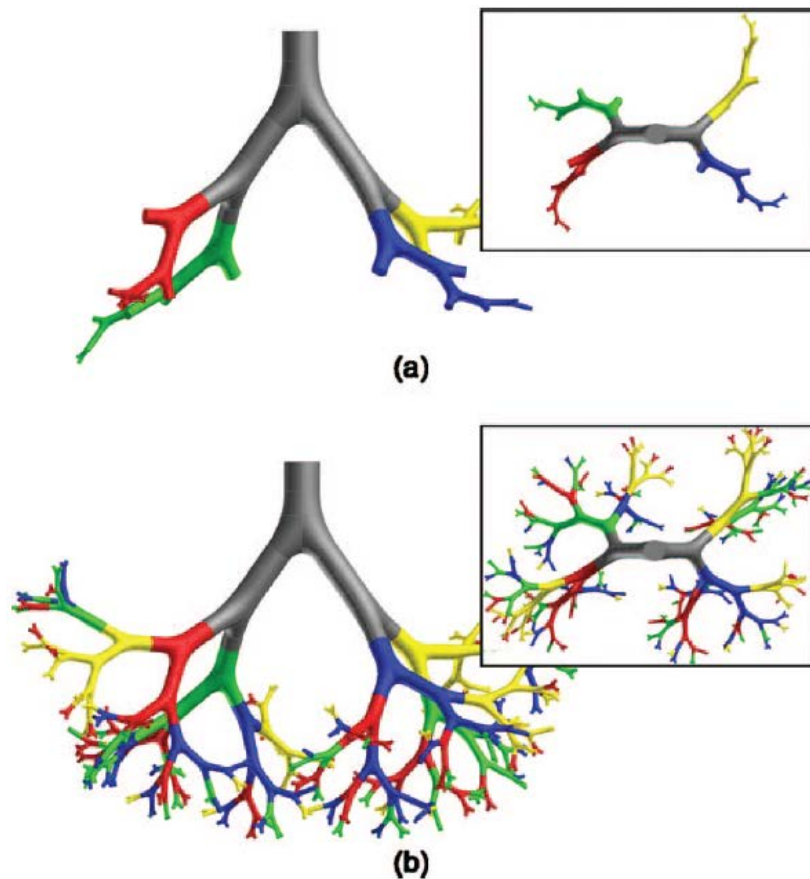


Figura 3.15: Modelo utilizado por Walters (2010).

Este mismo proceso se desarrolla a grandes rasgos en esta tesis, como se explicará en los siguientes capítulos.

En España no se han desarrollado muchas investigaciones en este área. En la Universidad Autónoma de Madrid (Castro 2003) y en la Universidad de Valladolid (Quispe 2010) se han desarrollado estudios fluidodinámicos, pero en este caso se han centrado en las vías aéreas altas, es decir, fosas nasales y boca.

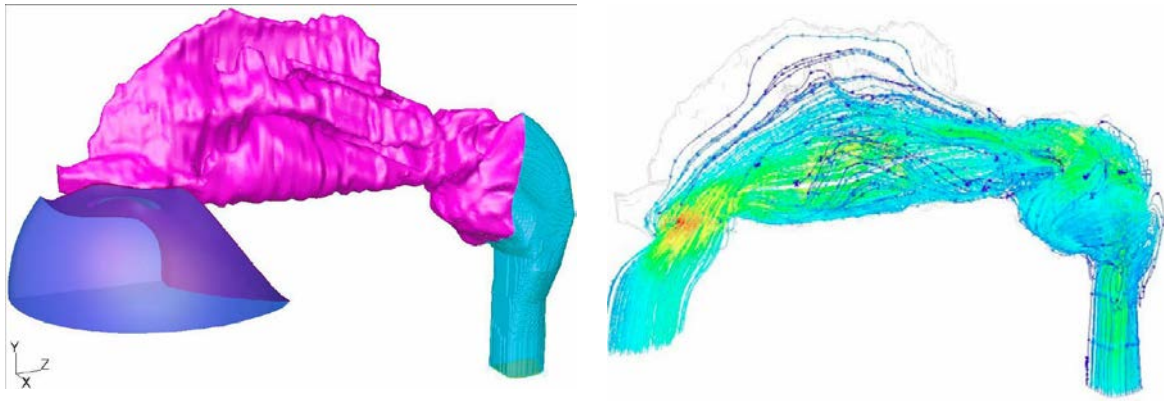


Figura 3.16: Modelo numérico de Quispe (2010).

Aparte del realismo geométrico, hay influencias adicionales para la precisión de las simulaciones numéricas como el método numérico empleado, la resolución computacional o las condiciones de contorno. Por tanto, siempre será necesario validar las soluciones numéricas con datos experimentales.

La validación de los resultados numéricos en este trabajo se ha llevado a cabo mediante la comparación de los flujos de aire obtenidos a la salida del pulmón con los obtenidos mediante espirometrías.

La espirometría es el análisis de los volúmenes pulmonares y flujos aéreos bajo circunstancias controladas. El espirómetro es un instrumento que mide volúmenes pulmonares mientras que el neumotacógrafo mide flujos aéreos. Los aparatos actuales integran ambos.

Otros trabajos realizados en España y en la línea de poder validar los resultados con espirometrías son los realizados gracias a la colaboración de la Universidad de Oviedo y Extremadura con el Instituto Nacional de Silicosis de Oviedo perteneciente al HUCA (Hospital Universitario Central de Asturias), y en el que se inscribe también la presente tesis. En ellos se han realizado validaciones de los modelos propuestos (Fernández 2014) gracias a la comparación con espirometrías reales.

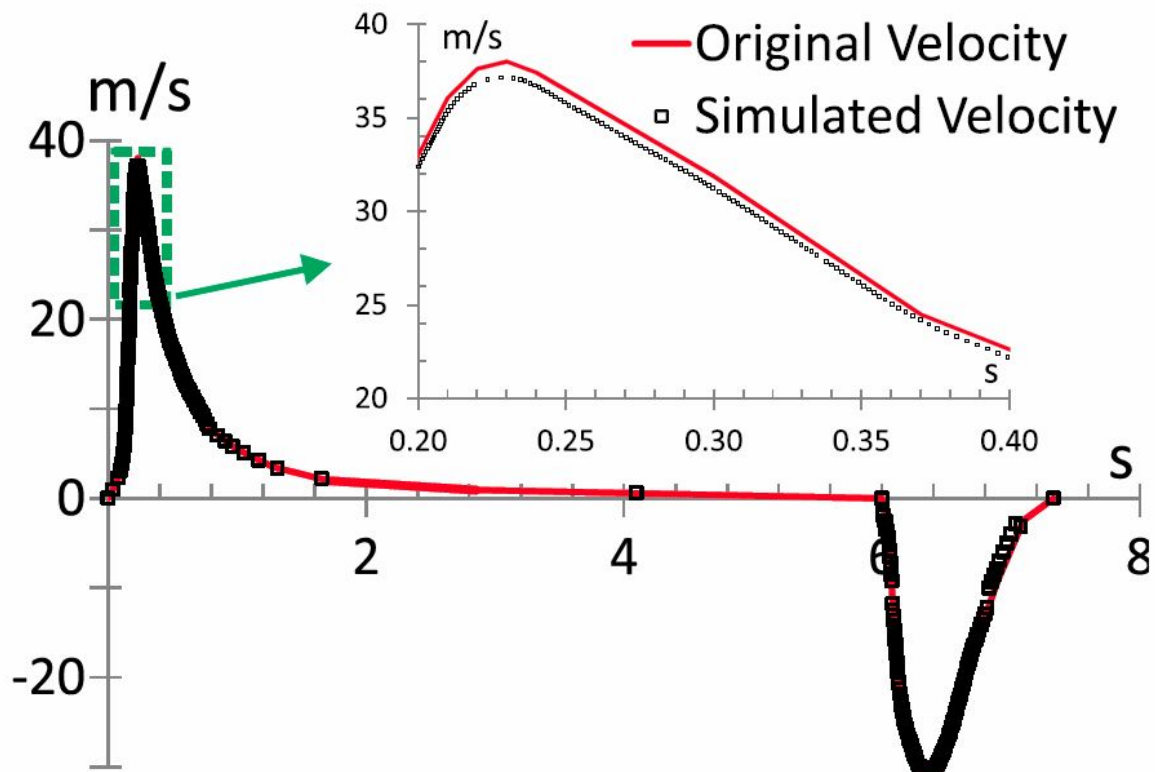


Figura 3.17: Comparación de espirometrías reales con resultados numéricos de la simulación CFD del pulmón. (Fernández 2014).

3.2. Conclusiones

En este trabajo se sigue por tanto la estrategia iniciada por Walters para tomar un único camino a estudiar dentro del árbol bronquial adentrándonos generación tras generación con un modelo más pequeño y manejable y, teniendo en cuenta la simetría del modelo, aplicando las correspondientes condiciones de contorno en aquellas entradas a ramas que no se hayan desarrollado en la geometría, pero en este caso utilizando un modelo paramétrico.

Aunque se sigue en principio las pautas del modelo simétrico de Weibel, se es consciente de la importancia de tener un modelo lo más realista posible. Tal como se explica en Nowak et al (2003), una buena predicción del campo de flujo en un pulmón real humano solo puede ser obtenida de una geometría real, la cual sólo puede ser aproximada hoy en día mediante CT o por un molde físico del pulmón humano.

El uso de CT y MRI implica una gran precisión a la hora de representar las vías aéreas, pero debido a las diferencias existentes entre individuos no permiten ensayar o simular sobre generalidades geométricas del pulmón. En cualquier caso, estudios estadísticos a partir de estas técnicas conducen a determinar cuáles son esas generalidades que nos permitan estudiar un pulmón “tipo”.

Como puede verse, la variedad de modelos utilizados para el estudio numérico de los pulmones es muy notable. Desde modelos sencillos simétricos y de pocas generaciones a modelos complejos y muy completos basados en fotografías y datos de pacientes reales. En función de la naturaleza del objetivo del estudio son más apropiados unos u otros modelos pero aún se está lejos de describir numéricamente el comportamiento del flujo de aire en los pulmones humanos.

La gran complejidad del pulmón humano, tal y como se ha venido describiendo a lo largo de este trabajo, no permite simular mediante técnicas de CFD el pulmón al completo. Incluso en el caso de poder modelar y mallar el pulmón humano, las vías aéreas en su totalidad, no se dispone aún de suficiente poder de cálculo para llevar a cabo esta simulación, a pesar de los últimos avances tecnológicos que han permitido aumentar considerablemente la potencia de los ordenadores y disminuir su precio. Es por eso que los autores recogidos en los estudios que se detallan han debido utilizar simplificaciones del árbol bronquial para llevar a cabo sus investigaciones.

De este tipo de simplificaciones y generalidades geométricas, hemos seleccionado varias para los distintos modelos que hemos ido desarrollando. Cada nueva consideración geométrica o adaptación a algún tipo de condición de contorno ha exigido rehacer el modelo tridimensional con el consiguiente trabajo. Es por esto que un modelo paramétrico ofrece una gran versatilidad, ya que ofrece la posibilidad de modificar los parámetros que definen su geometría, y con mucho menos esfuerzo, para poder desarrollar nuevos estudios numéricos.

Puesto que, como se ha comentado antes, estamos lejos de poder simular numéricamente un modelo completo y realista del pulmón humano (obtener un modelo tridimensional si es posible a través de tomografías y reconstrucción 3D pero no su simulación) es necesario validar las aproximaciones que se llevan a cabo

en estos estudios. Como se verá más adelante, disponer de un modelo de pulmón cuya geometría puede ser parametrizable es una buena forma de estudiar cómo afectan cualitativamente modificaciones en longitudes, ángulos, radios, etc.. al flujo de aire en los pulmones y cuánto difieren de modelos más realistas pero más costosos de simular.

El uso conjunto de técnicas de imagen médicas con modelos paramétricos debería ser el siguiente paso, para aunar la precisión a la hora de recoger datos de las técnicas CT y MRI con la versatilidad de un modelo flexible que se adapte a diferentes configuraciones geométricas gracias al modelado paramétrico.

4. METODOLOGÍA PROPUESTA

4. METODOLOGÍA PROPUESTA

Repaso a los modelos no paramétricos realizados en estudios previos y que han servido como base para la obtención del modelo paramétrico que se presenta.

A continuación se muestra el proceso de generación de la geometría mediante un software de dibujo paramétrico

4.1. Modelos previos

La línea de investigación que estudia el flujo de aire en las vías aéreas respiratorias, es totalmente nueva en la Universidad de Extremadura. En el Área de Mecánica de Fluidos se han dado diversas aplicaciones a la dinámica de fluidos computacional, pero no existían estudios previos de modelos de pulmón para el estudio del paso del aire a través del mismo.

Los primeros modelos sobre los que se trabajó fueron realizados en programas sencillos de modelado típicos de entornos CFD. Los primeros resultados se buscaron a partir de modelos realizados en Ansys Gambit. Este entorno de modelado es muy primitivo pero suficiente para desarrollar los primeros modelos. A cambio el programa permite un muy buen control sobre la malla generada y es perfectamente compatible con el programa de simulación numérica utilizado, ANSYS Fluent.

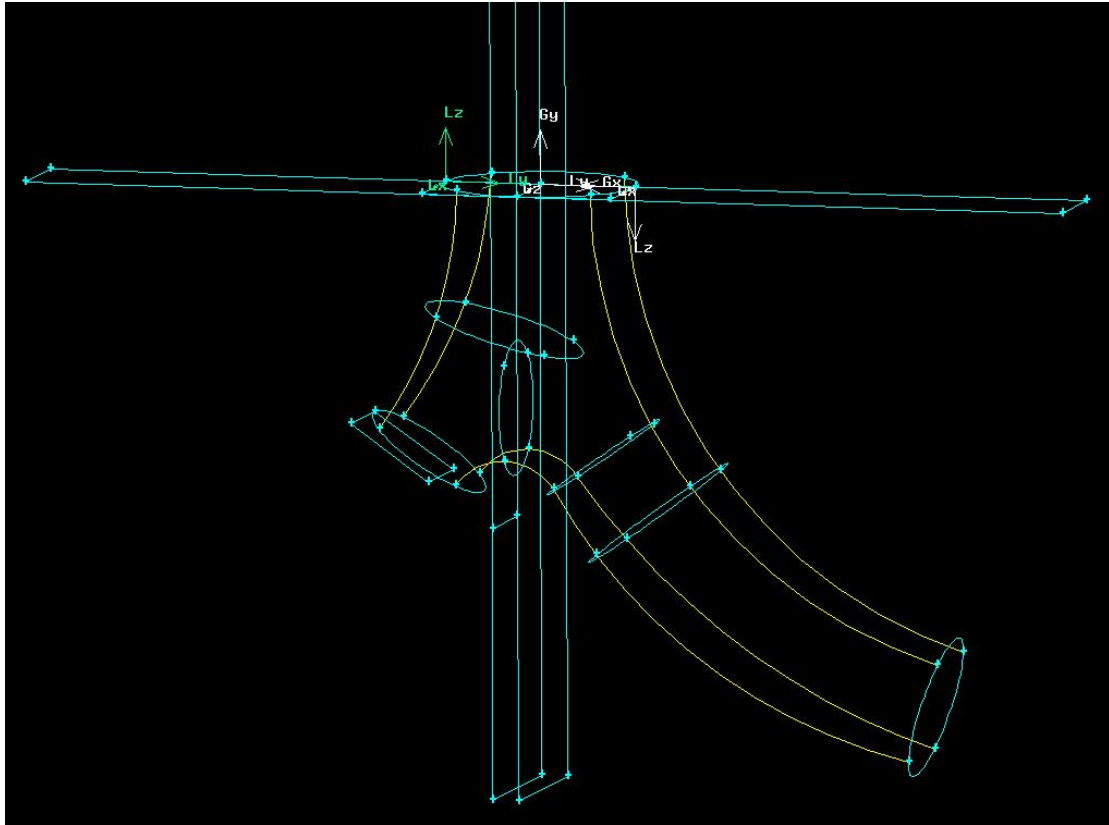


Figura 4.1: Generación de la bifurcación de un modelo en Gambit.

La complejidad creciente de los modelos estudiados, hizo optar por otros programas de dibujo más completos. Los siguientes modelos fueron desarrollados en Autodesk AutoCad, lo que permite total libertad a la hora de definir la geometría y mayor simplicidad a la hora de realizarla. Como contrapartida, fue necesario realizar exportaciones a formatos reconocible por los programas CFD dónde se simularían los modelos, lo que exige una limpieza de la geometría de los mismos previa a la edición de la malla. En cualquier caso, el mallado del modelo se siguió realizando en primer lugar en Ansys Gambit. Más tarde se realizó la exportación del modelo a ANSYS Workbench dónde el mallado se realizó con el módulo Meshing del mismo.

En primer lugar se optó por representar geometrías dicotómicas simétricas como la presentada por Weibel. Para dotar de mayor realismo al modelo se optó por seguir modelos de otros autores para representar la asimetría del modelo en las

primeras generaciones. En las siguientes figuras pueden observarse algunos de los resultados obtenidos.

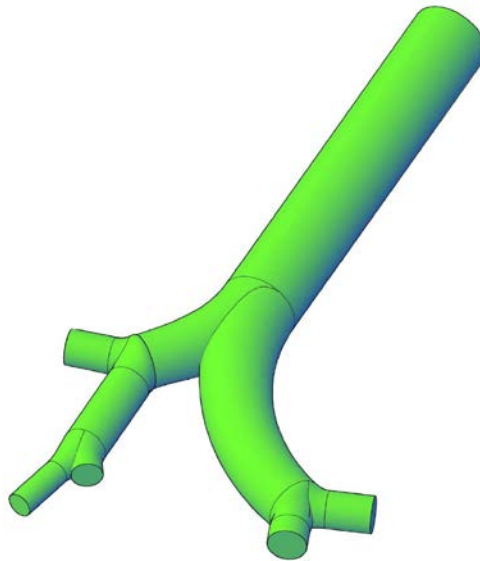


Figura 4.2: Modelo simple de las 3 primeras generaciones realizado con Autocad.

Los primeros modelos representaban esta simetría en los ángulos de bifurcación y longitud de ramas (Figura 4.2) y los más complejos ya tenían en cuenta los ángulos entre planos consecutivos de las bifurcaciones. Se siguió el modelo presentado por Li et al. (2007).

Branch	Diameter (mm)	Length (mm)	In-plane branching half angle (degree)	Out-of-plane spatial angle (degree)
Trachea	16	100	0	0
L1	11.1	22.00	35	0
L2	7.3	15.60	63	25
L3	8.9	26.00	15	25
L4	6.67	11.27	18	60
L5	4.27	10.81	33	60
L6	5.2	21.00	61	5
L7	6.4	8.00	15	5
R1	12.0	50.00	73	0
R2	8.0	11.00	44	15
R3	7.5	16.00	48	15
R4	7.00	9.70	28	0
R5	5.35	9.70	70	0
R6	4.27	10.81	25	35
R7	6.67	11.27	65	35

Figura 4.3: Tabla de las dimensiones usadas para las primeras generaciones. (Li et al. 2007).

En la figura 4.4 se muestra un modelo preparado para realizar simulaciones de depósito de partículas. Se trata de un modelo asimétrico siguiendo los datos geométricos de Li para las primeras bifurcaciones y una geometría simétrica de Weibel a partir de ahí hasta la séptima generación.

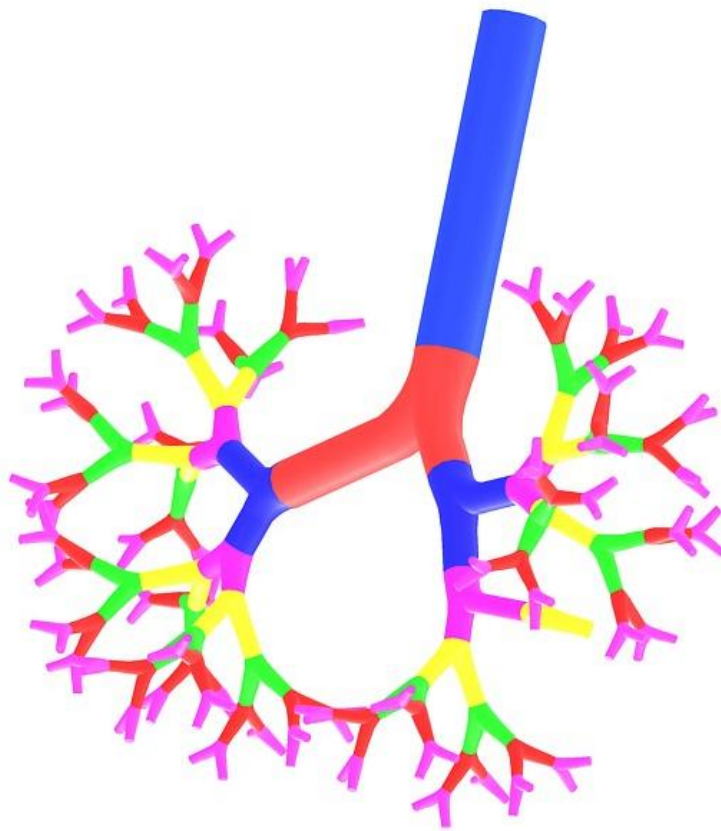


Figura 4.4: Modelo siguiendo las dimensiones de Li et al. (2007) realizado con Autocad ampliado hasta la séptima generación mediante geometría de Weibel

En la figura 4.5. se muestra una variación del modelo anterior en la que optó por dar cierta curvatura a las ramas del modelo con el objetivo de darle más realismo y estudiar su efecto en la deposición de las partículas. Se realizó a partir de solevaciones en Autocad manteniendo los datos geométricos del modelo anterior.

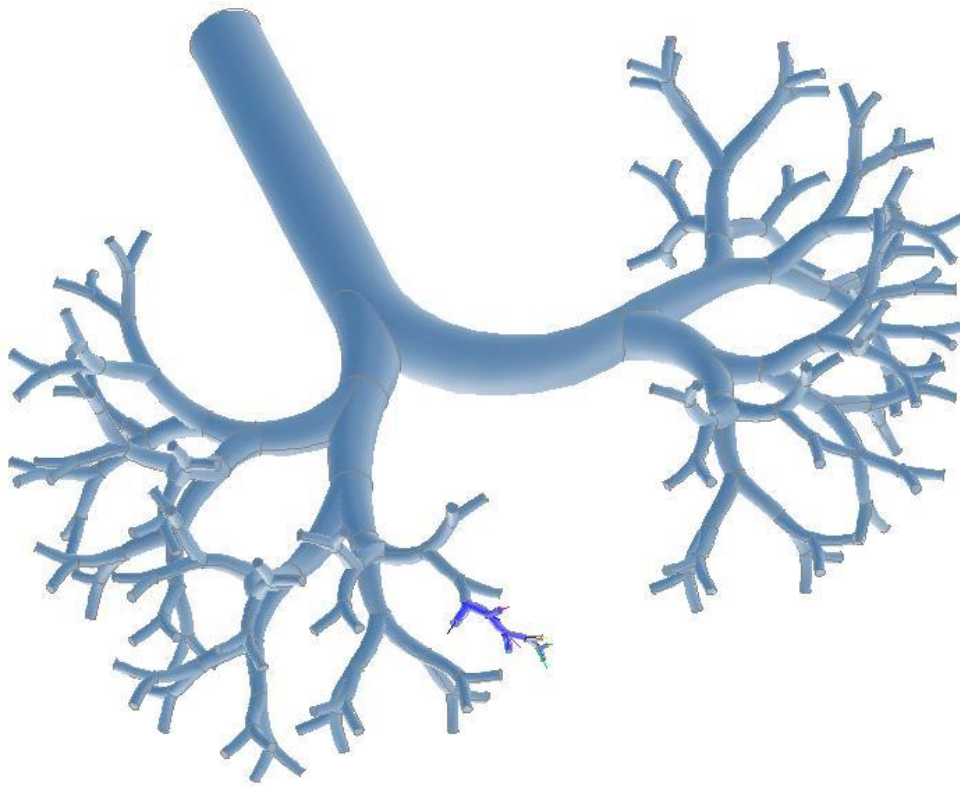


Figura 4.5: Variación del modelo tipo Weibel de siete generaciones dando curvatura a las ramas.

El crecimiento exponencial del número de terminales bronquiales del pulmón humano no permite simular el pulmón más allá de unas pocas generaciones de bifurcaciones. Para ilustrar este concepto se modeló al completo la zona conductiva del pulmón (17 generaciones) de un modelo simétrico de Weibel y de otro con cierta asimetría en las principales bifurcaciones (Figuras 4.6 y 4.7). Estos modelos no pueden ser utilizados para realizar simulaciones, sin embargo mostraron ser muy útiles para el estudio de la distribución en un plano de las diferentes generaciones del modelo que pueden ser comparadas a posteriori con una imagen CT que muestre una sección del pulmón (Figura 4.8).

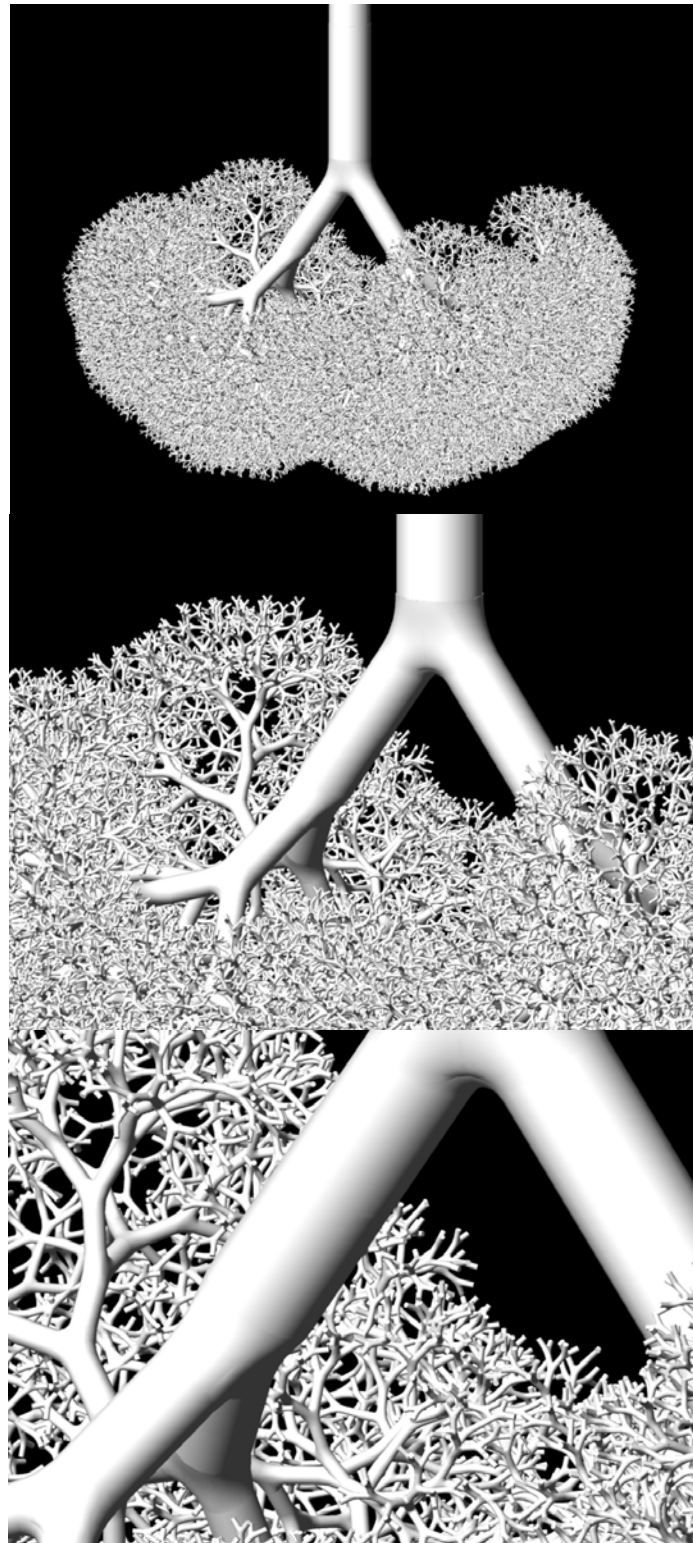


Figura 4.6: Modelado en Autocad de toda la zona conductiva del pulmón siguiendo estrictamente una geometría de Weibel.

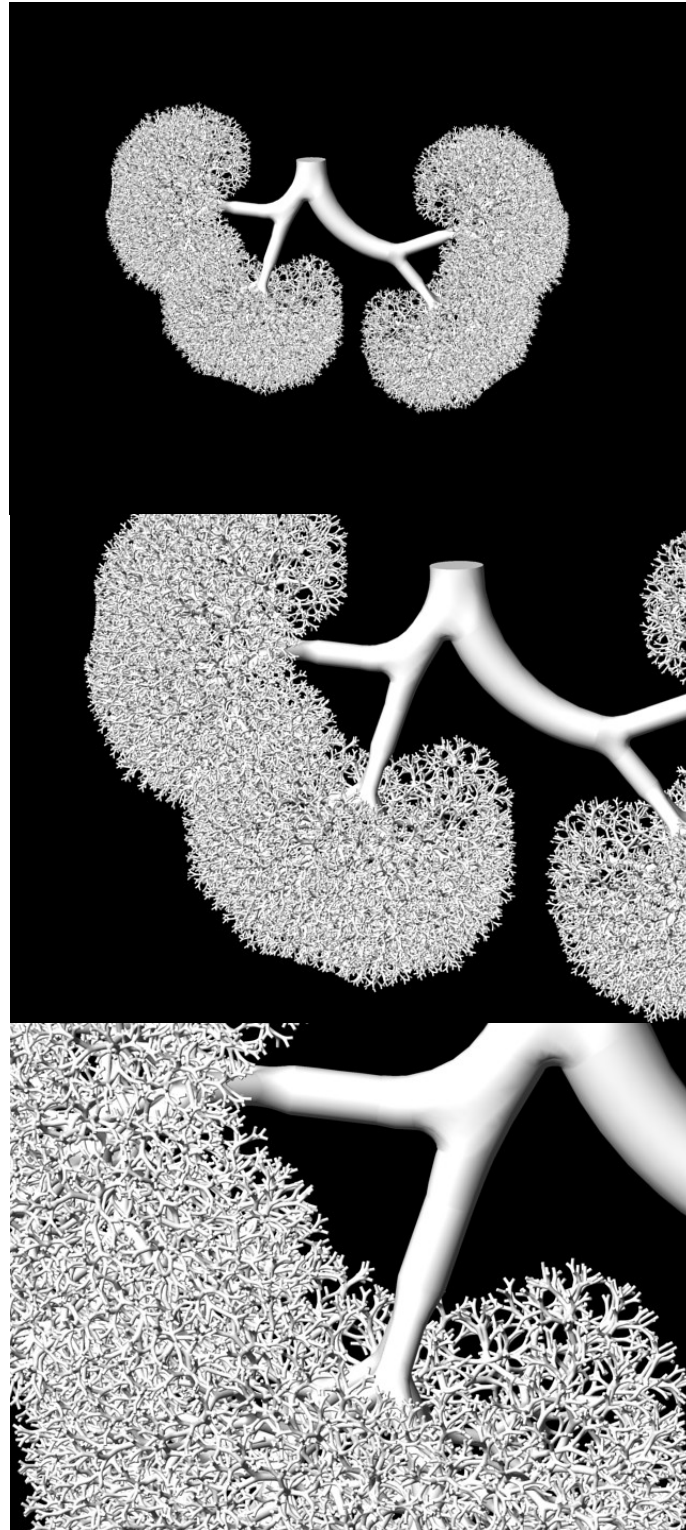


Figura 4.7: Variación del modelo anterior en Autocad de toda la zona conductiva del pulmón dando cierta simetría al modelo de Weibel.

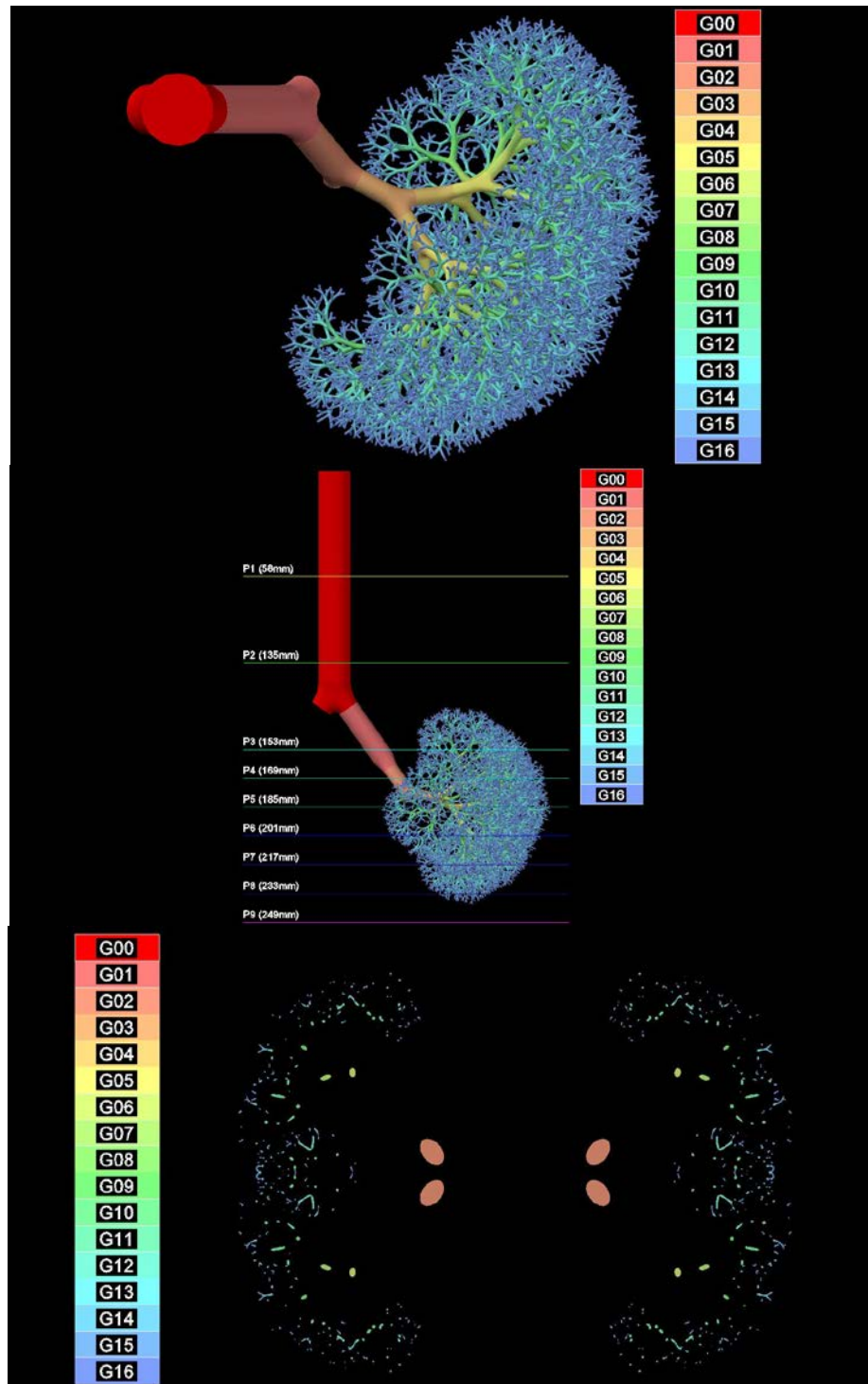


Figura 4.8: Modelo en Autocad preparado para poder comparar imágenes médicas con un plano de las diferentes generaciones del pulmón.

Puesto que no es posible simular la zona conductiva del pulmón al completo, es necesario realizar simplificaciones del modelo que puedan manejar las capacidades de cálculo actuales. En la figura 4.9 se muestra un modelo realizado en Gambit que reproduce las 17 generaciones de la zona conductiva del pulmón a través de un único camino. Esta simplificación ha sido adoptada en el modelo paramétrico que se presentará más adelante.

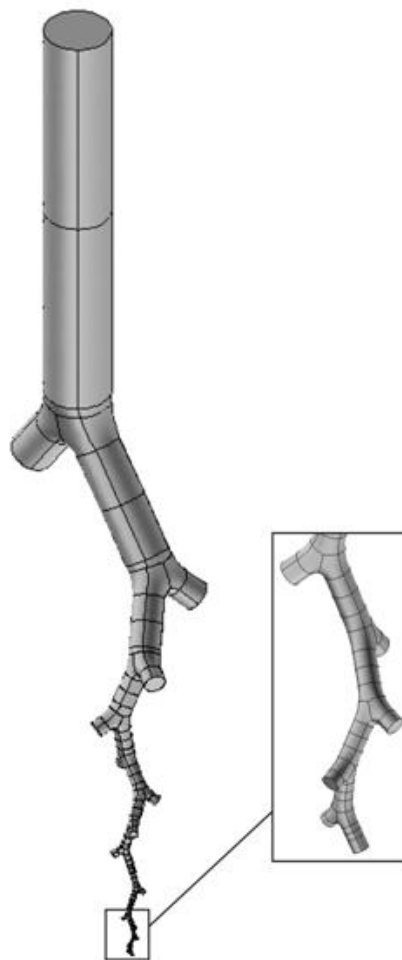


Figura 4.9: Modelo de geometría de Weibel desarrollado en Gambit para simular el flujo aéreo siguiendo la estrategia de Walters et al. (2010).

Posteriormente se fue completando el modelo añadiendo la geometría de las vías aéreas altas. Los datos de esta geometría de las fosas nasales fue tomada del trabajo de Castro (2003) en el que se hizo un estudio fluidodinámico de esta parte

del sistema respiratorio. Esta geometría fue obtenida de imágenes CT. La geometría de la boca, laringe y faringe fueron tomadas del modelo de Stapleton (2000).

El modelo más completo previo al parametrizado de las vías aéreas que se presenta, consistió en un modelo que incluía las vías aéreas altas, las 3 primeras generaciones del árbol bronquial según una geometría extraída de Li et al. (2007) y una continuación del modelo siguiendo una geometría de Weibel hasta la generación 17 contando con la simplificación propuesta por Walters (2010) que permite estudiar a partir de ahí un único camino (Figura 4.10).

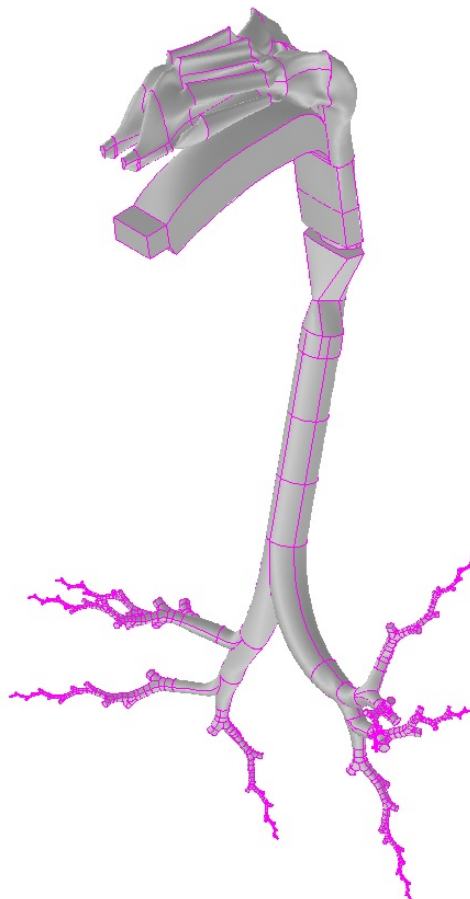


Figura 4.10: Inclusión de las vías aéreas altas al modelo Weibel-Walters anterior e importación de las primeras bifurcaciones del árbol bronquial desde un modelo de Autocad.

4.2. Modelo paramétrico del pulmón

El modelado de las vías respiratorias, desde la tráquea hasta los bronquios del nivel 17, se ha realizado con el programa Design Modeler de ANSYS®. A pesar de sus limitaciones en cuanto al modelado de superficies complejas y su pobre manejabilidad y experiencia de usuario, se ha elegido este programa debido a que a diferencia de otros programas de dibujo paramétrico más avanzados, como CATIA, INVENTOR, SOLIDWORKS, UNIGRAPHICS... DesignModeler está totalmente integrado en el Workbenk de ANSYS y no necesita de importaciones previas del modelo y/o sus parámetros. Esto permite crear una serie de puntos de diseño de cara a las simulaciones, de manera que obtener resultados a nivel del postproceso se reduce a preparar los parámetros y dejar que el programa realice todas las iteraciones cambiando los parámetros al inicio de cada nueva simulación asociada al punto de diseño establecido.

Generar una geometría tridimensional en Design Modeler no es muy diferente a hacerlo con cualquier otro software paramétrico del mercado en cuanto a la filosofía de trabajo. Por lo general se parte de un boceto en 2D con el que se intenta generar un polígono o geometría cerrada que pueda ser usado posteriormente por las herramientas del programa para generar una superficie generada por los lados del polígono, un volumen a través de una operación de extrusión o revolución, un barrido de un sección en una determinada dirección, etc...

Para la realización de la tráquea es suficiente con realizar un barrido o extrusión a partir de una circunferencia creada previamente en un boceto sobre un plano.

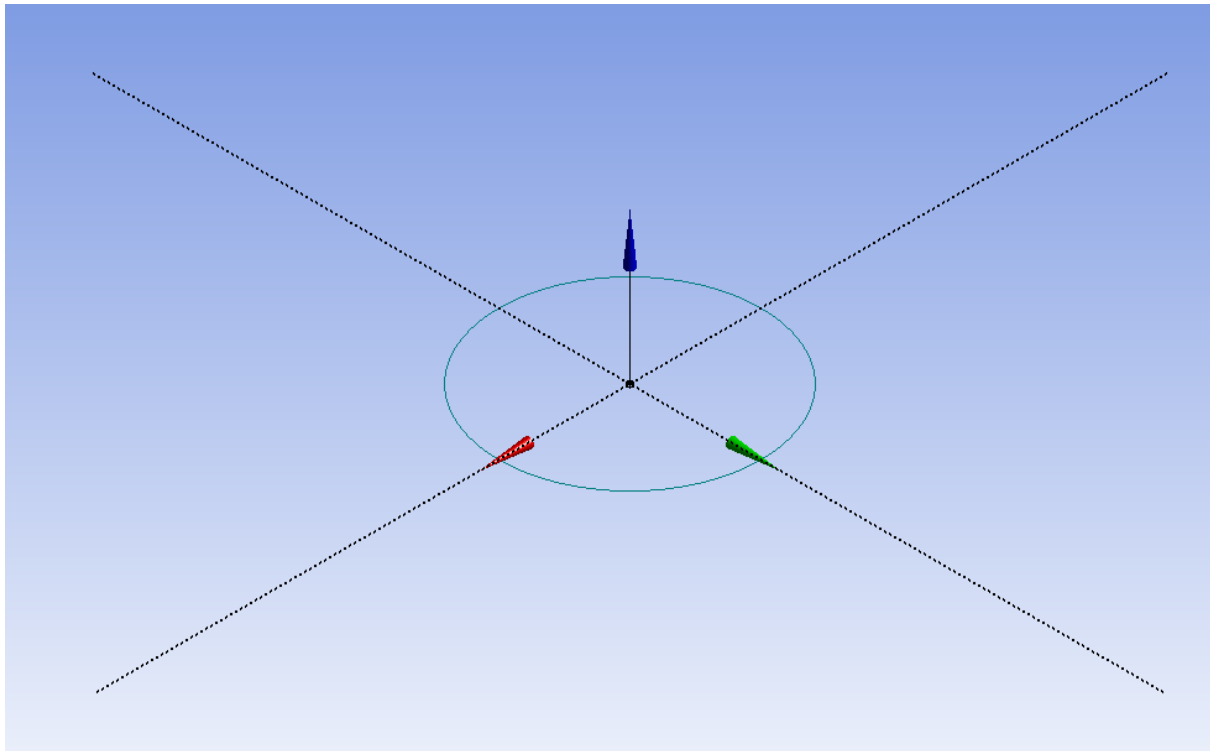


Figura 4.11: Circunferencia para la generación de la tráquea mediante una extrusión.

El diámetro de esta circunferencia será el primer parámetro del modelo. Para que sea reconocido como tal, es necesario marcarlo como tal. En ese momento, el diámetro de la circunferencia no puede modificarse desde Desing Modeler, sino que hay que acudir a la tabla de parámetros que encontraremos en el espacio Workbench de ANSYS, donde se podrá dar un valor numérico o una expresión que lo relacione con otros parámetros. En el modelo paramétrico presentado en este trabajo, esta tabla se ha vinculado a una hoja excel para que de esta forma los parámetros puedan relacionarse entre sí por fórmulas de manera más cómoda. Se ha realizado de este modo porque se disponía una hoja de cálculo con los datos de un modelo tridimensional. En realidad, en el entorno de Workbench es posible relacionar los parámetros a través de expresiones, tal como se hace con una hoja de cálculo.

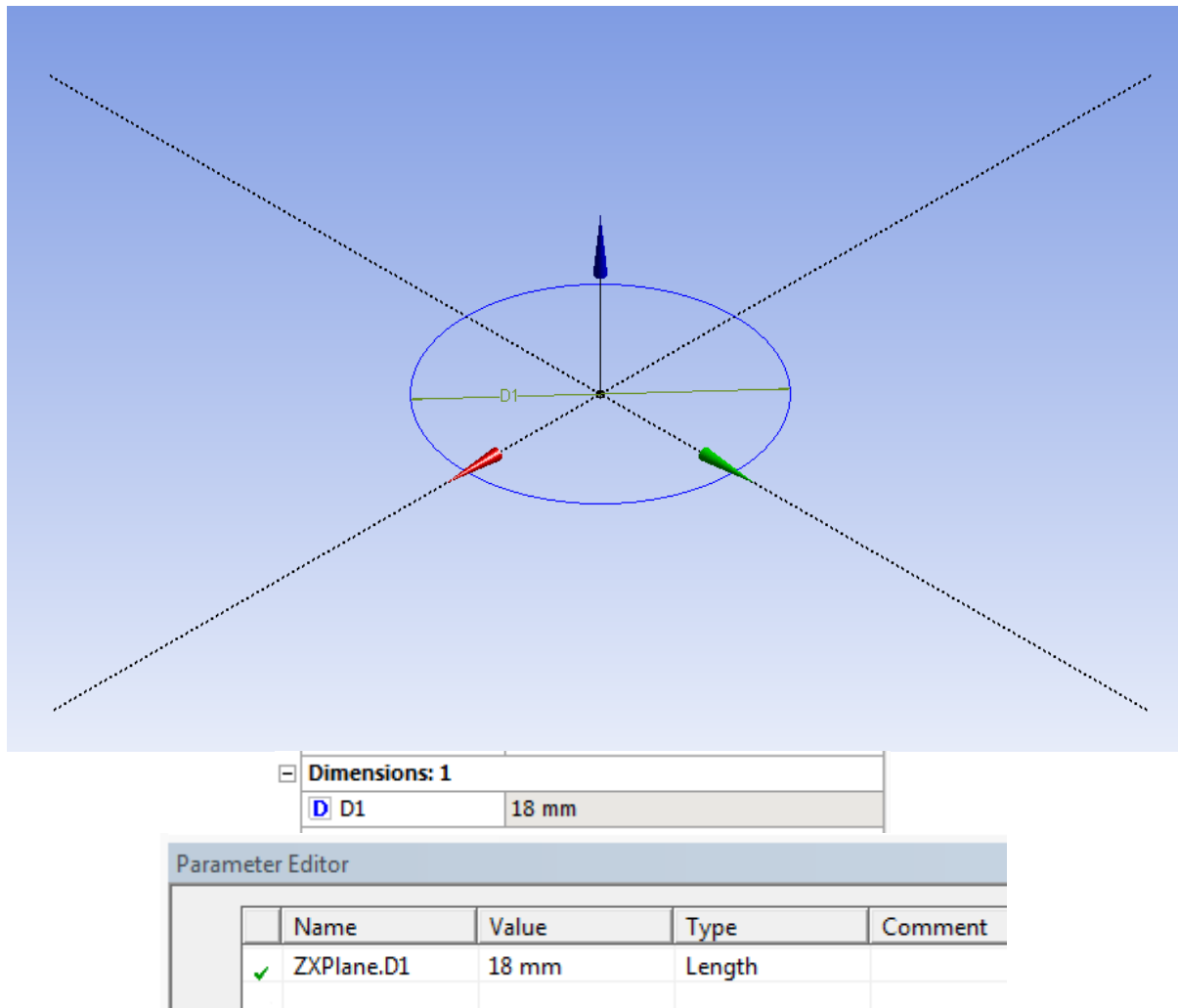


Figura 4.12: Generación de un nuevo parámetro para el modelo, en este caso, el diámetro de la tráquea.

Para relacionar un parámetro, ya designado como tal por Design Modeler, con un valor de una tabla Excel hay que crear un nuevo módulo de Excel en el espacio de trabajo del proyecto en Workbench y relacionarlos. Previamente hay que modificar la hoja excel para que ANSYS pueda obtener los valores que se desean obtener como parámetros usando la herramienta de Excel “Definir nombre”.

Se crean en Excel tres columnas. La primera contendrá el nombre de la variable a convertir en parámetro, la segunda el valor numérico del parámetro y la última las unidades a emplear. Si no se especifican unidades el valor será de tipo

adimensional, y no podrá usarse para, por ejemplo, determinar una longitud. Para asignar el nombre se utiliza la herramienta “Crear desde la selección” en “Formulas / Nombres definidos” seleccionando previamente las tres columnas. Habrá que indicar cuál de las columnas es la que quedará definida como nombre del parámetro.

Diametros			Longitudes			Radios		
Nombre	Valor	Unidad	Nombre	Valor	Unidad	Nombre	Valor	Unidad
Diam00	10,80	mm	Long00	120,00	mm	Gdist00	28,37	mm
Diam01	7,33	mm	Long01	47,82	mm	Gdist01	19,25	mm
Diam02	4,97	mm	Long02	24,85	mm	Gdist02	13,06	mm
Diam03	3,37	mm	Long03	16,86	mm	Gdist03	12,47	mm
Diam04	2,67	mm	Long04	12,67	mm	Gdist04	9,81	mm
Diam05	2,11	mm	Long05	10,69	mm	Gdist05	7,94	mm
Diam06	1,68	mm	Long06	9,01	mm	Gdist06	6,50	mm
Diam07	1,36	mm	Long07	7,61	mm	Gdist07	5,39	mm
Diam08	1,12	mm	Long08	6,42	mm	Gdist08	4,53	mm
Diam09	0,93	mm	Long09	5,41	mm	Gdist09	3,85	mm
Diam10	0,78	mm	Long10	4,57	mm	Gdist10	3,31	mm
Diam11	0,66	mm	Long11	3,85	mm	Gdist11	2,88	mm
Diam12	0,57	mm	Long12	3,25	mm	Gdist12	2,54	mm
Diam13	0,50	mm	Long13	2,74	mm	Gdist13	2,27	mm
Diam14	0,44	mm	Long14	2,31	mm	Gdist14	2,05	mm
Diam15	0,39	mm	Long15	1,95	mm	Gdist15	1,87	mm
Diam16	0,36	mm	Long16	1,65	mm	Gdist16	1,73	mm
Diam17	0,33	mm	Long17	1,39	mm	Gdist17	6,26	mm
Diam18	0,30	mm	Long18	1,17	mm	Gdist18		mm
Diam19	0,28	mm	Long19	0,99	mm	Gdist19		mm
Diam20	0,27	mm	Long20	0,83	mm	Gdist20		mm
Diam21	0,26	mm	Long21	0,70	mm	Gdist21		mm
Diam22	0,25	mm	Long22	0,59	mm	Gdist22		mm
Diam23	0,25	mm	Long23	0,50	mm	Gdist23		mm

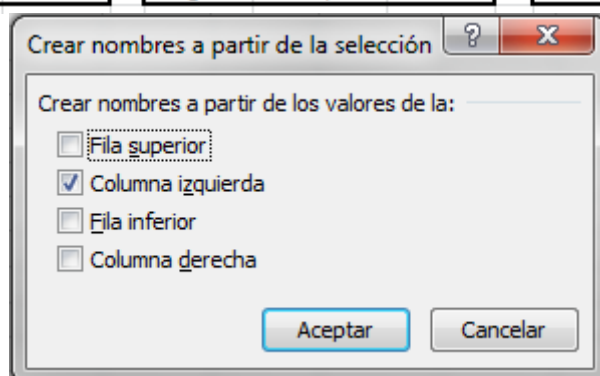


Figura 4.13: Edición de la tabla Excel para su conexión con la lista de parámetros.

Una vez definido el parámetro en el modelo de DesignModeler, se le asigna un nombre. Por defecto tendrá un nombre relacionado con el plano y boceto en el que se creó. Este nuevo parámetro hay que relacionarlo con el parámetro correspondiente de la tabla de parámetros recogido a su vez en la hoja excel.

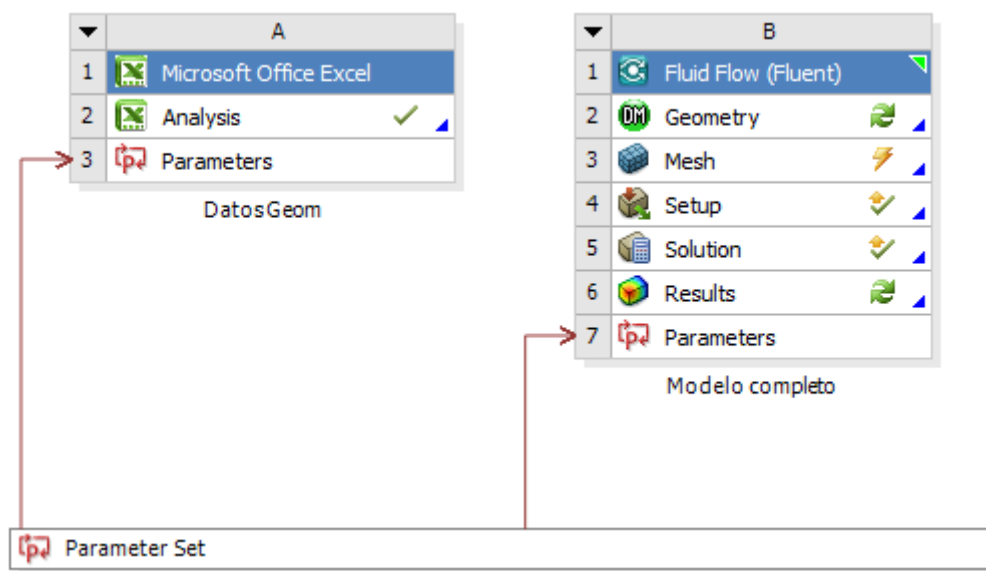


Figura 4.14: Relación creada en el espacio de trabajo de Workbench entre los módulos de Excel y CFD.

Los parámetros que se han fijado en la hoja excel son los de longitud de la rama, diámetro y radio y ángulo de la bifurcación. Tras generar en el primer boceto una circunferencia, se dimensiona fijando su diámetro. Éste se fija como un parámetro en el programa y se asocia al parámetro del diámetro de la tráquea importado de la hoja Excel. Para ello el programa dispone de una ventana de control de parámetros a la que se puede acceder haciendo doble clic sobre el cuadro Parameter Set. En esta ventana de control se reparten los parámetros en dos listas, la lista de parámetros importada de excel y la lista de parámetros creados con el programa durante la edición del modelo. Para relacionar los parámetros del modelo con su correspondiente parámetro importado de la hoja de cálculo, basta con

modificar las propiedades del parámetro del modelo dando al mismo como valor en el campo: “expresión” el nombre automático que el programa asoció al valor excel importado. De esta manera, si se modifica la hoja Excel se verán afectados los parámetros del modelo vinculados a la misma.

Outline of All Parameters				
	A	B	C	D
1	ID	Parameter Name	Value	Unit
2	Input Parameters			
3	DatosGeom (A1)			
4	P1	Diam00	18	mm
5	P2	Diam01	12,211	mm
6	P3	Diam02	8,2844	mm
7	P4	Diam03	5,6202	mm
8	P5	Gdist01	19,249	mm
9	P6	Gdist02	13,059	mm
10	P7	Gdist03	12,474	mm
11	P9	Long00	120	mm
12	P10	Long01	47,822	mm
13	P11	Long02	24,853	mm
14	P12	Long03	16,861	mm
15	P15	Gdist00	28,374	mm
16	P94	Diam04	4,4513	mm
17	P95	Diam05	3,5129	mm
18	P96	Diam06	2,8072	mm
19	P97	Diam07	2,2714	mm
20	P98	Diam08	1,861	mm
21	P99	Diam09	1,5439	mm
22	P100	Diam10	1,2969	mm
23	P101	Gdist04	9,8088	mm
24	P102	Gdist05	7,9382	mm
25	P103	Gdist06	6,5029	mm
26	P104	Gdist07	5,3925	mm
27	P105	Gdist08	4,5265	mm
28	P106	Gdist09	3,8462	mm
29	P107	Gdist10	3,3083	mm
30	P108	Long04	12,665	mm
31	P109	Long05	10,685	mm
32	P110	Long06	9,0149	mm
33	P111	Long07	7,6055	mm
34	P112	Long08	6,4165	mm
35	P113	Long09	5,4134	mm
36	P114	Long10	4,5671	mm
37	P221	Diam11	1,1031	mm
38	P222	Diam12	0,95	mm
39	P223	Diam13	0,82846	mm
40	P224	Diam14	0,73153	mm

Figura 4.15: Detalle de la lista de parámetros creada en el programa con la importación de la hoja Excel.

Una vez fijado el primer diámetro se realiza una extrusión para dar longitud a la tráquea. La distancia de esta operación puede ser fijada como parámetro en el programa y se asociará al correspondiente a la longitud de la tráquea en la tabla de parámetros.

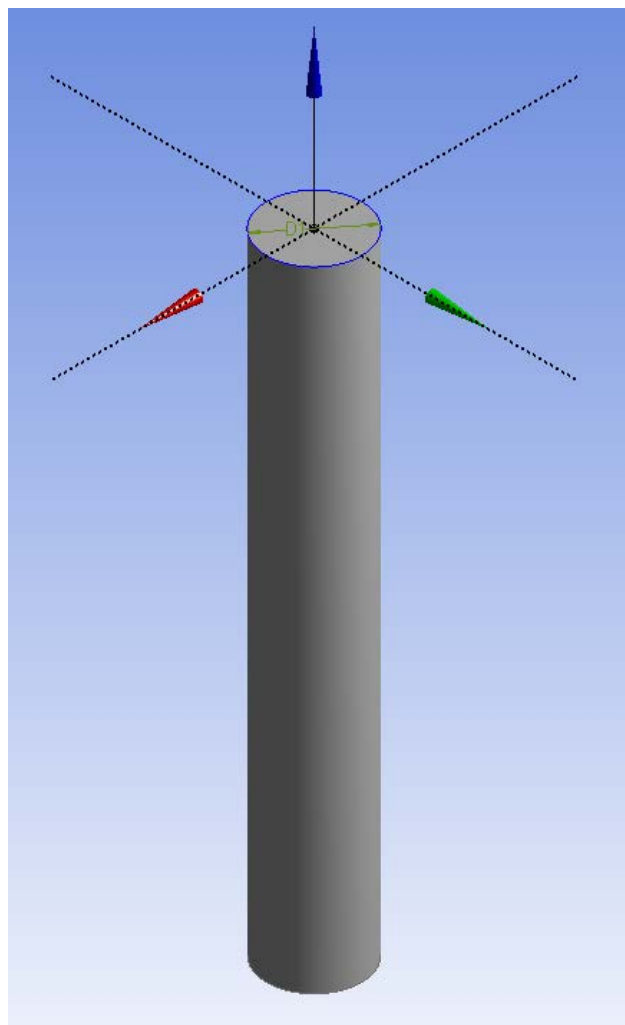


Figura 4.16: Generación de la tráquea mediante una extrusión.

Una vez creada la tráquea se procede a crear la primera bifurcación. El método que se sigue en la generación de esta bifurcación es el mismo que se seguirá en cada una de los niveles del pulmón, similar al seguido en la generación de los modelos tridimensionales no paramétricos estudiados previamente en nuestra línea de investigación. Es muy importante fijar correctamente no sólo los parámetros dimensionales, que están controlados finalmente por la hoja excel, si no también todas las restricciones geométricas que definen el modelo para cualquier valor de dichos parámetros, es decir, paralelismos, tangencias, perpendicularidad y otras coincidencias geométricas. Si no se fijan correctamente estas restricciones, un cambio en los parámetros de partida puede dar lugar a una indefinición de la geometría dando lugar a resultados inesperados o a la no consecución del modelo por parte del programa. Estas restricciones geométricas pueden introducirse automáticamente mientras se va dibujando o manualmente con las herramientas de restricción del programa. En cualquier caso es posible comprobar y editar las restricciones una vez creadas.

La bifurcación se crea a partir de la rotación de la circunferencia que define el tramo anterior del pulmón en torno a una perpendicular a la dirección del mismo que pasa por su centro. Tal y como se aprecia en la figura 4.17, se crean 4 nuevos planos definidos por esta rotación donde se asienta la circunferencia de la siguiente generación y una intermedia. Se crea además un plano medio que sirve de base para crear la circunferencia para el empalme inferior de la bifurcación, con forma de “pantalón”.

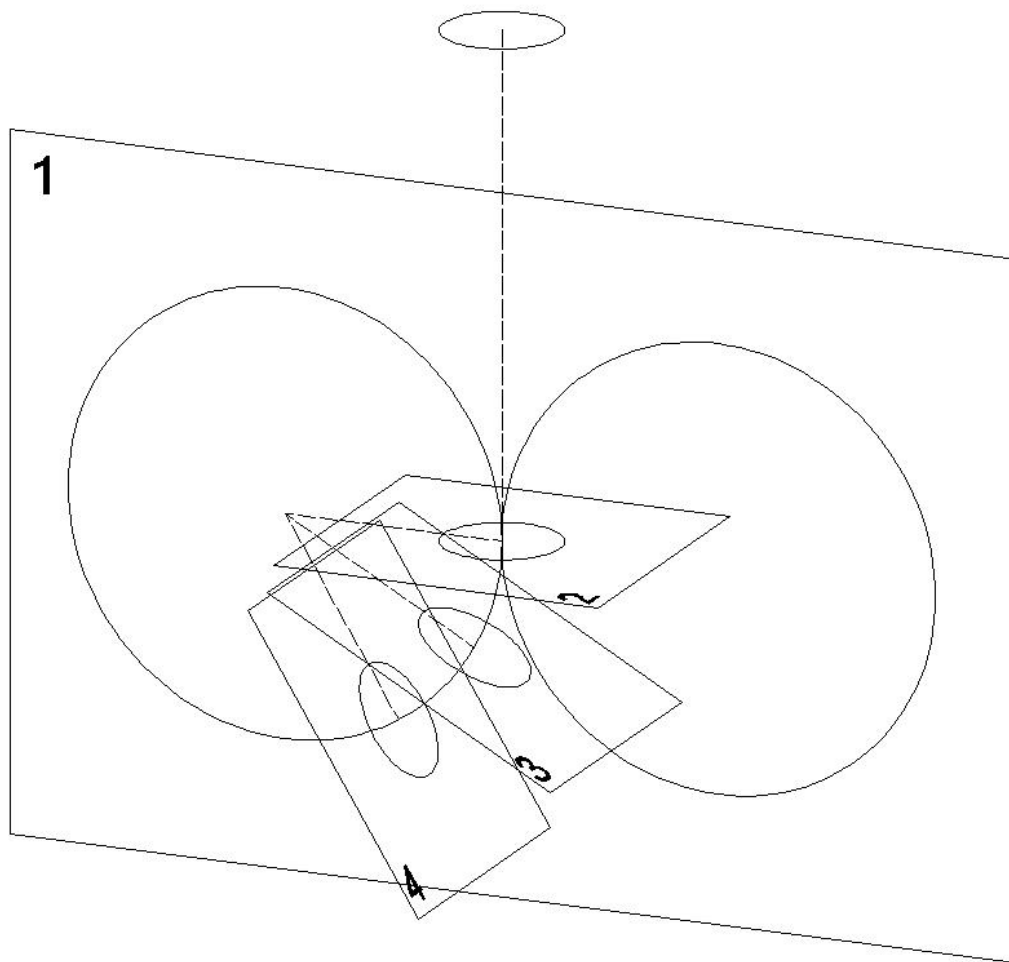


Figura 4.17: Esquema de las circunferencias y planos base para la generación de la bifurcación.

Para comenzar a crear los planos sobre los que se construirá la bifurcación, se toma en primer lugar el plano medio de la misma y se trazan sobre el mismo los radios de bifurcación de cada una de las dos ramas en las que se divide la principal. Estos radios se representan como sendas circunferencias y quedan marcados como parámetros en el programa para poder relacionarlos a continuación con la hoja excel. En el modelo desarrollado para este trabajo, se han considerado las bifurcaciones dicotómicas y simétricas, por lo que no es necesario marcar ambos radios, será suficiente parametrizar uno mediante la dimensión de su diámetro

mientras que la otra circunferencia puede fijarse indicando una restricción de igual diámetro, de simetría, etc.

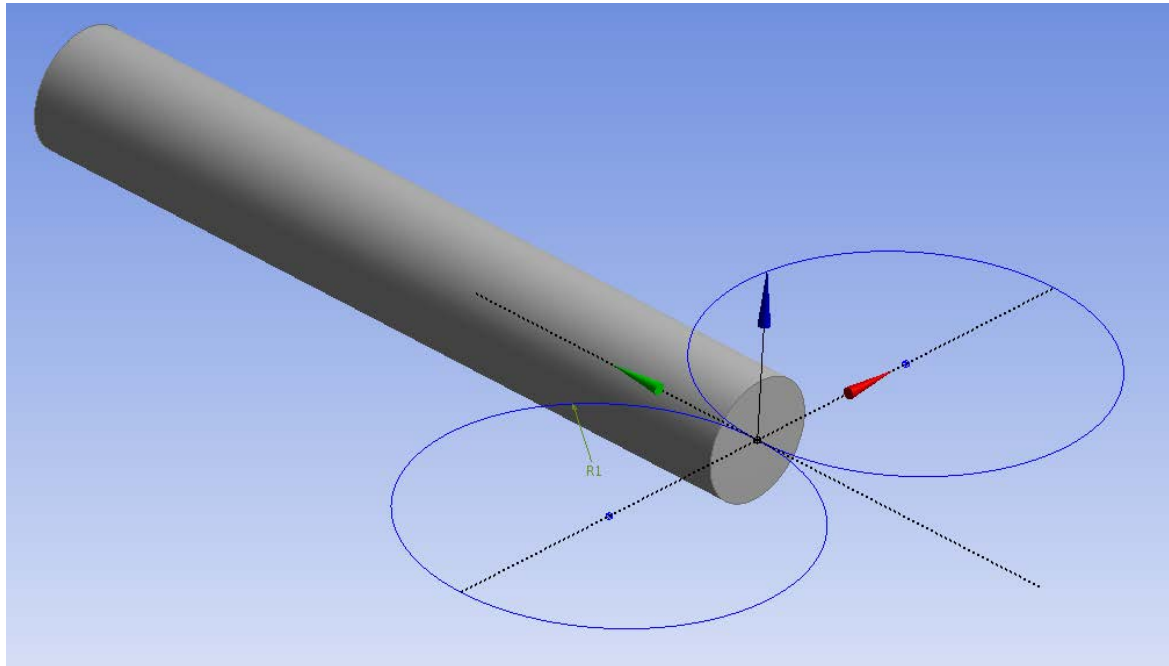


Figura 4.18: Trayectorias de giro de la bifurcación.

Sobre cada una de las circunferencias creadas se trazan dos radios que quedarían contenidos en los planos donde asentarán las circunferencias de apoyo de la bifurcación. Perpendiculares a estos se trazan dos líneas de una longitud genérica que definirán los vectores normales de los planos de apoyo citados. Para que estos vectores queden debidamente definidos, los radios a los que son perpendiculares se acotan angularmente. El ángulo del radio trazado previamente, que da lugar al plano de apoyo para la circunferencia de salida de la bifurcación, se parametriza para que quede asociado al valor definido en la hoja de cálculo. Al radio intermedio dibujado se le asignará una expresión que devuelva la mitad del radio anterior como parámetro para su ángulo (parámetros A3 y A4 en la figura 4.19).

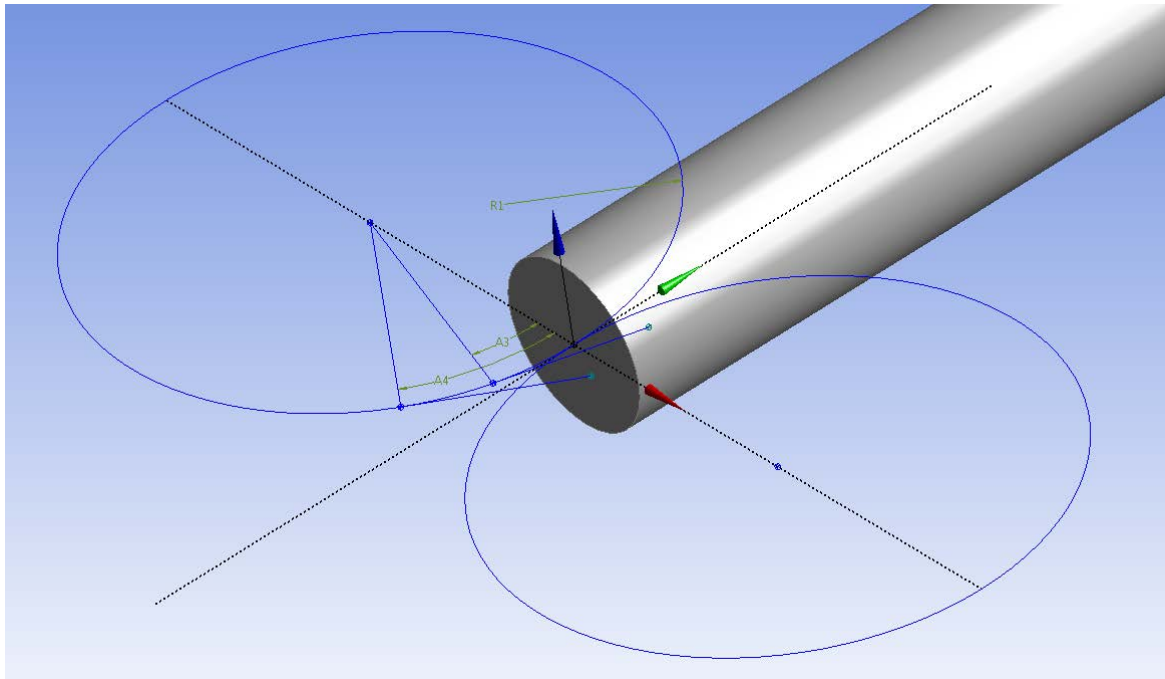


Figura 4.19: Ángulos para los vectores normales que definen los planos de apoyo de las circunferencias.

Dada la simetría de la bifurcación comentada previamente, para el lado contrario bastará con aplicar restricciones de simetría o igualdad. Con este mismo método de modelado paramétrico, pueden definirse bifurcaciones asimétricas haciendo aún más complejo el modelo, lo que da una mayor flexibilidad a la hora de adoptar una determinada forma global pero complica mucho las fases posteriores, especialmente el mado.

Finalmente, en este mismo plano se traza un arco de circunferencia tangente a las circunferencias que marcan los radios y cuyo centro quede en medio de la bifurcación. Este arco se utilizará como ayuda para trazar el empalme inferior de la bifurcación.

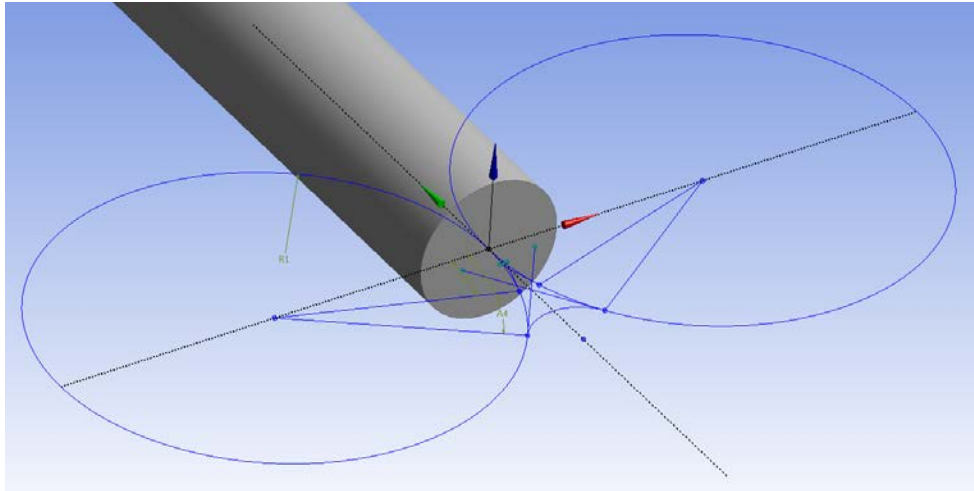


Figura 4.20: Arco de apoyo para el “pantalón” de la bifurcación.

A partir de los vectores normales creados en el plano medio, se definen los planos de apoyo para las circunferencias base de la bifurcación. Estos planos se definen a partir de un punto base y el vector normal creado. Para el punto base, se selecciona el de intersección entre el radio y el vector normal. Éste será ahora el origen de coordenadas del plano creado.

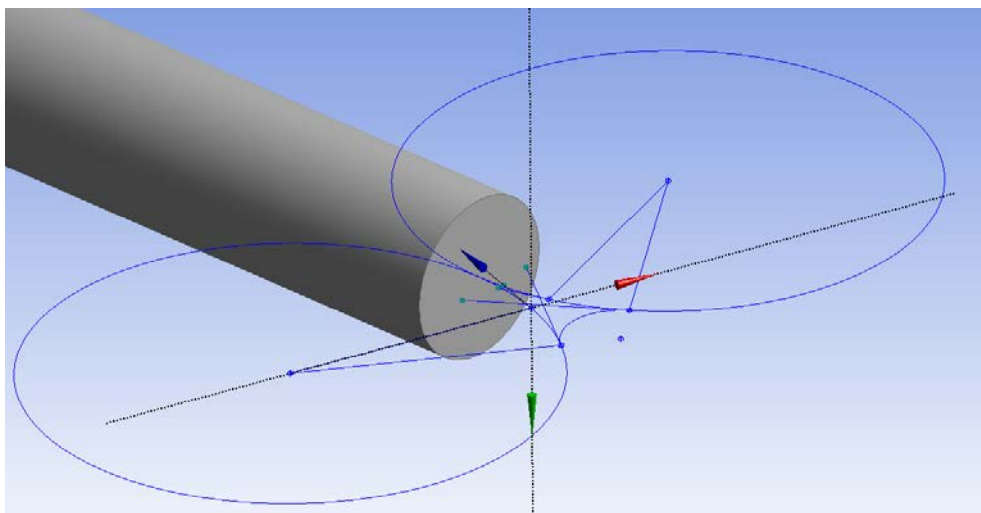


Figura 4.21: Plano generado a partir del vector normal creado.

El vector Z de este plano quedará en la dirección del vector normal, o inverso si se marcara así a la hora de crearlo, y los vectores X e Y quedan definidos por el programa en función del plano previo creado. Nos interesa mantener el vector X coplanar al plano medio, para que más adelante las divisiones realizadas en las circunferencias de apoyo guarden coherencia con las hechas en las bifurcaciones anteriores. En este caso, la primera bifurcación tras la tráquea, no existe apenas desviación entre el eje X y dicho plano, pero según se construyen las diferentes generaciones del árbol bronquial la desviación comienza a ser notable. En cualquier caso, no conviene dejar ninguna dimensión del modelo al azar o sin parametrizar para que el rango de posibles modificaciones sobre el mismo sea lo más amplio posible. Por tanto, para mantener el eje X en el plano medio y controlar de esta forma la orientación del plano de apoyo de cada circunferencia base, se traza sobre el último plano creado un punto o segmento que sirva de referencia para crear un segundo plano por tres puntos que sí quedará perfectamente orientado. Este segundo plano se realiza mediante una definición por tres puntos, que serán, el origen de coordenadas del plano anterior, como origen de coordenadas del nuevo plano, un punto en la nueva dirección X, que será el centro de la circunferencia que marca el radio de giro por lo que coincidirá con la dirección el radio de giro, y un punto para el eje Y, que será el punto genérico que se trazó en el plano anterior. Automáticamente el eje Z queda definido, en la misma dirección que en el plano anterior, puesto que ambos planos son coplanares.

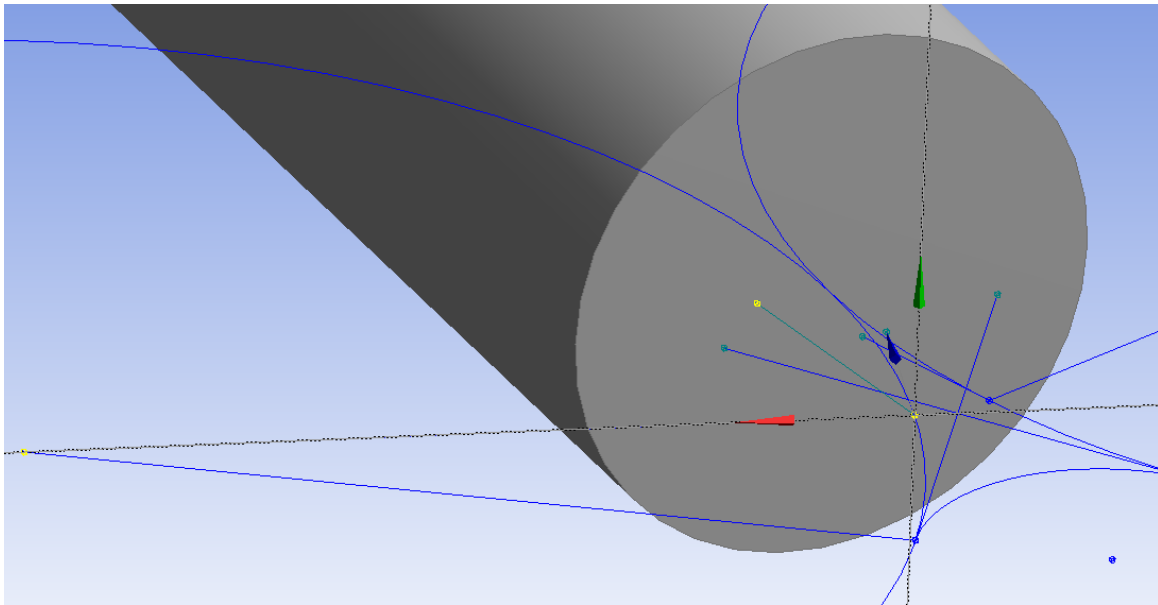


Figura 4.22: Generación de un nuevo plano con una orientación preestablecida.

Siguiendo el mismo método se obtienen los restantes cuatro planos de apoyo para los círculos base, realizando en cada uno de ellos dos bocetos. El primero contendrá una circunferencia centrada en la trayectoria de giro, de manera que sería la posición que ocuparía la circunferencia inicial de la bifurcación si hubiese girado, siguiendo la trayectoria de giro marcada, los ángulos señalados anteriormente. El segundo boceto contendrá una segunda circunferencia tangente a la anterior en el borde exterior de la bifurcación que se utilizará como base para construir las superficies que encerrarán el volumen de la bifurcación. Es de vital importancia para el buen comportamiento del modelo paramétrico que las restricciones geométricas que se definen en estos pasos, alineaciones, paralelismos, tangencias, etc., queden perfectamente marcadas y no aparezcan ni en defecto ni en exceso, para que el modelo pueda reconstruirse automáticamente con éxito al modificar los parámetros que lo definen.

Los diámetros de las circunferencias de las salidas de la bifurcación se asocian a sus parámetros correspondientes según el modelo, esto es a los diámetros del tramo principal de la siguiente generación. Sobre el plano intermedio creado se asienta una circunferencia del mismo diámetro que las salidas de la

bifurcación, es decir el diámetro del siguiente tramo de pulmón. El diámetro de la circunferencia del plano intermedio tendrá como diámetro la media de los diámetros de entrada y salida de la bifurcación, expresión que también quedará parametrizada.

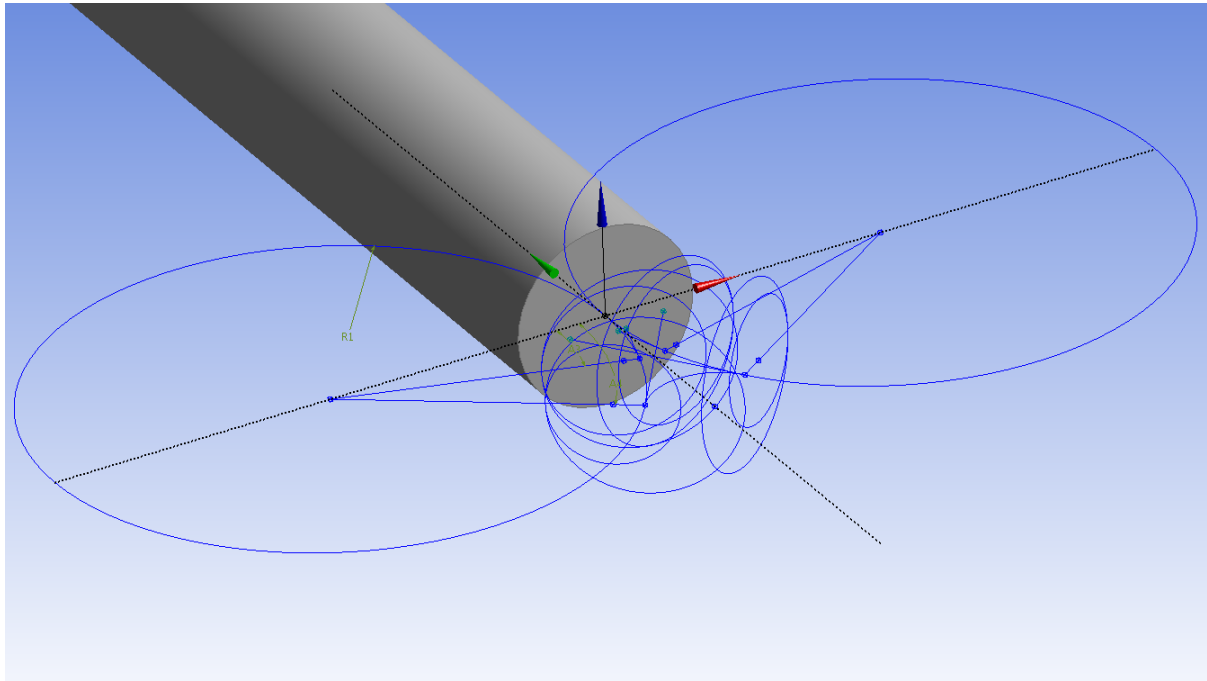


Figura 4.23: Circunferencias base para la generación de la bifurcación.

Para la generación del “pantalón”, se creará un plano perpendicular al plano medio sobre el que se asentaron los radios de giro. En este plano se repite la misma metodología que en los anteriores. En este caso la circunferencia de referencia, del mismo diámetro que la generación de partida, se centra en el punto medio del arco creado en el plano medio, mientras que la circunferencia base para la construcción de la bifurcación será tangente interior a ésta en el punto superior de la misma.

Una vez creadas las circunferencias de referencia se crean las líneas que las unen y que sirven de base para crear las superficies que cierran el volumen de la bifurcación. Estas líneas se crean con líneas en tres dimensiones apoyadas sobre las circunferencias anteriores. Para lograr ese punto de apoyo se dividen las

circunferencias en ocho segmentos, que nos dan a su vez ocho puntos de apoyo para dichas líneas.

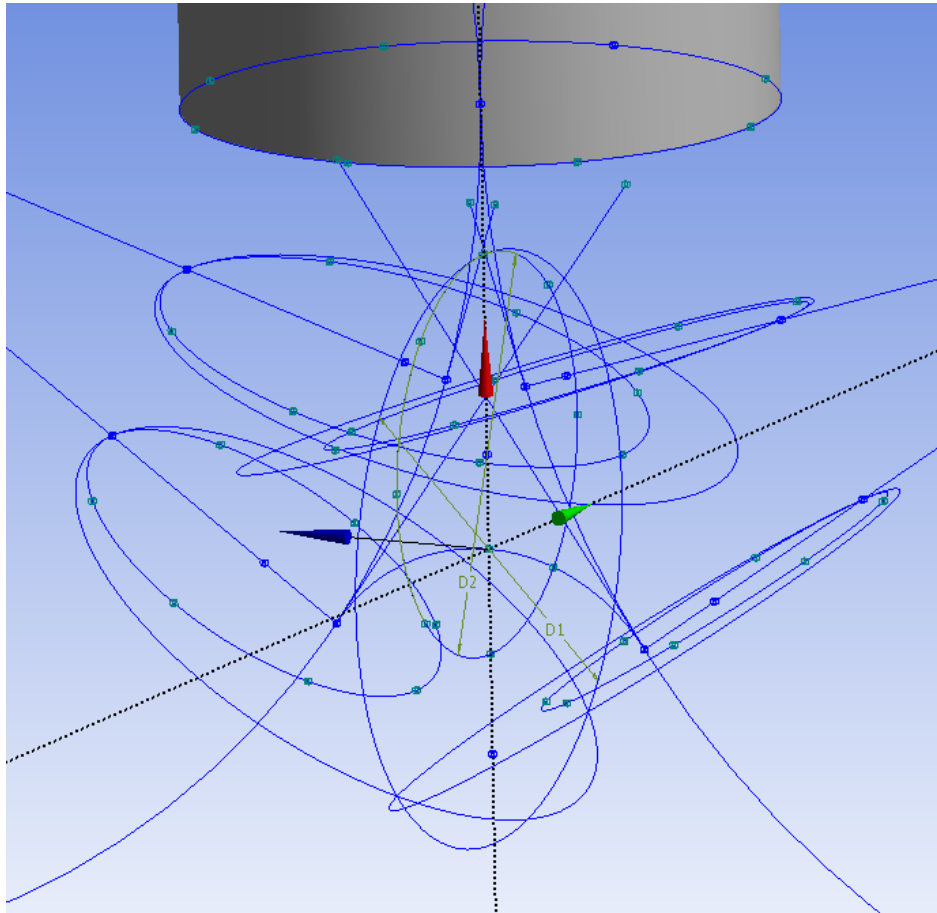


Figura 4.24: Circunferencia y plano base para la generación del “pantalón” y divisiones sobre las circunferencias para lograr los puntos de apoyo.

Las herramientas que usa el programa para crear las superficies, exigen que los tramos de circunferencias contenidos en los bocetos sean pasados a líneas de construcción. Estas líneas junto con las tridimensionales creadas anteriormente son las que cierran la superficies que encierran la bifurcación.

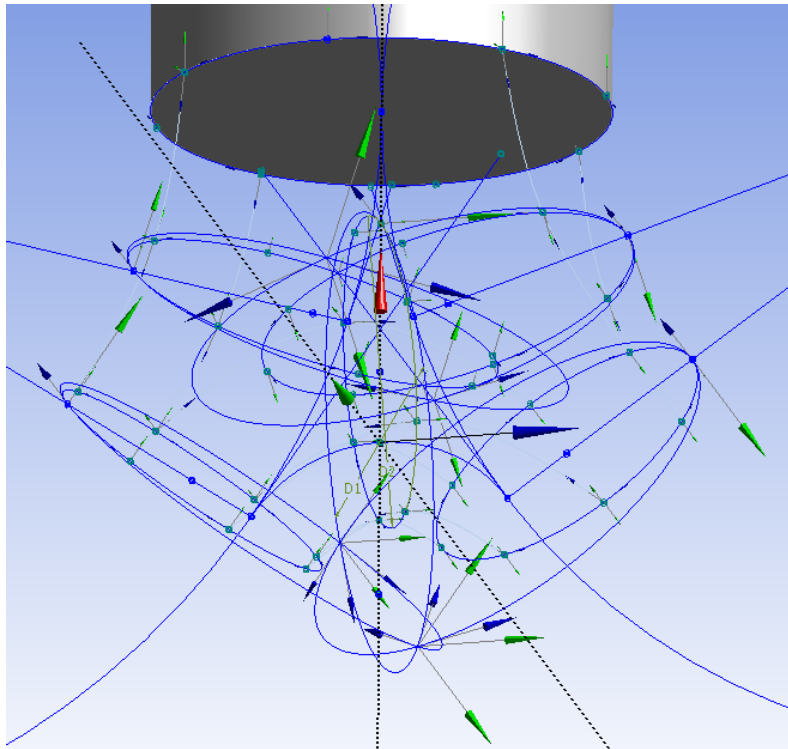


Figura 4.25: Conversión de las líneas de boceto a líneas de construcción.

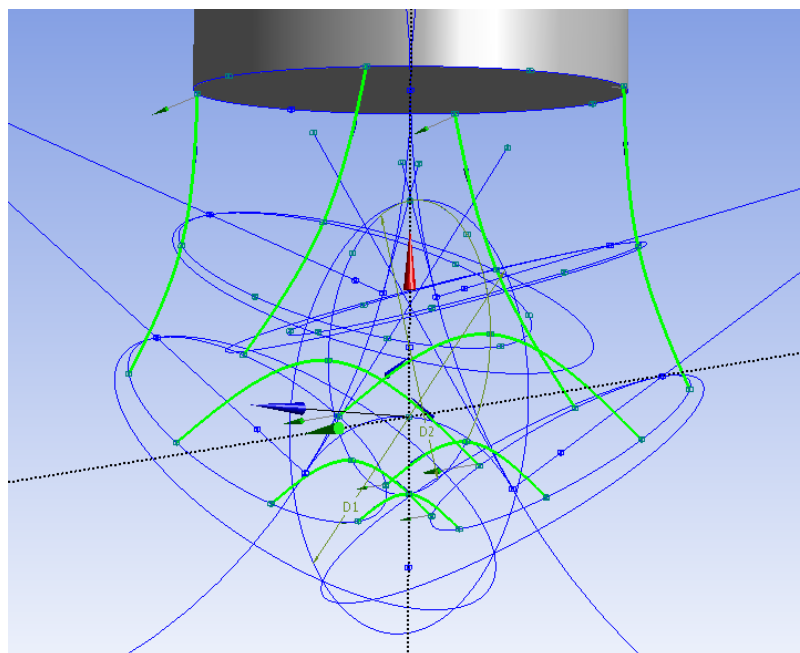


Figura 4.26: Generación de las líneas 3D restantes que delimitan el contorno de la bifurcación.

A partir de los polígonos tridimensionales cerrados que forman las líneas creadas anteriormente se generan las superficies que recogen la bifurcación.

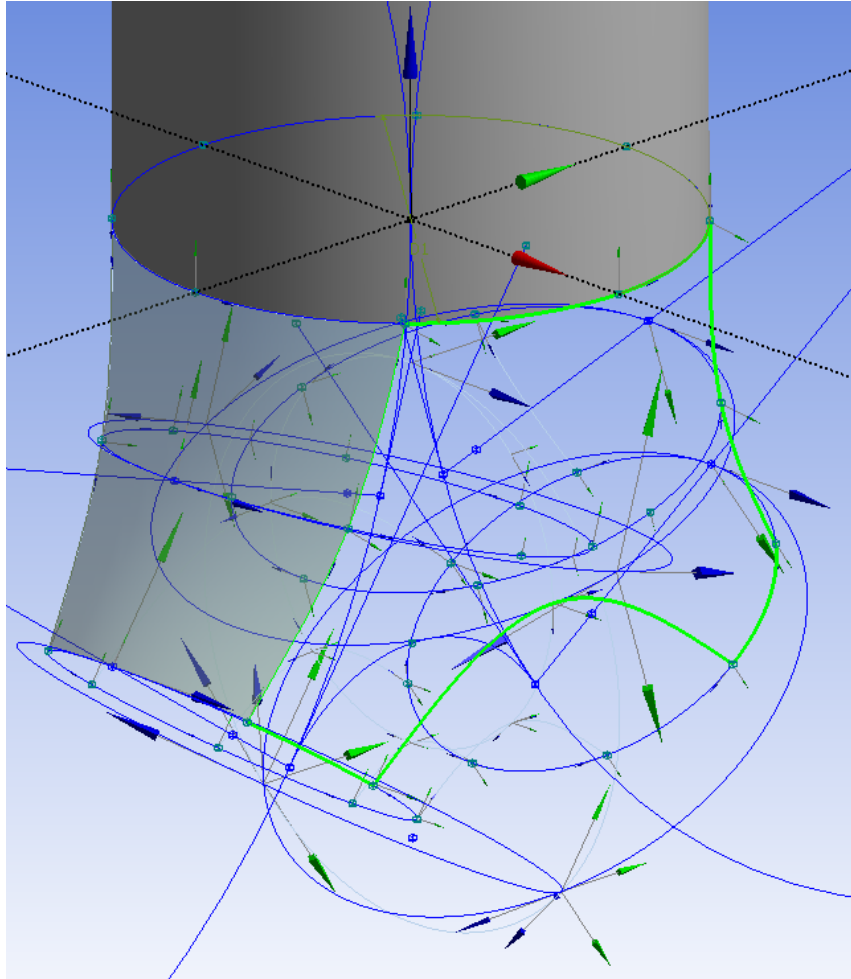


Figura 4.27: Superficies de contorno creadas a partir de las líneas de construcción creadas.

Se necesitará igualmente igualmente crear superficies, a partir de las circunferencias de entrada y salida, para cerrar el volumen que se quiere crear. Utilizando más o menos puntos y líneas de apoyo se obtendrán más o menos superficies para cerrar el volumen del modelo. Cuantas más superficies se creen, más se complicará la fase de mallado del modelo, pero se dispondrá de más

superficies de control para el estudio numérico para, por ejemplo, controlar el número de partículas que se depositan sobre las paredes del modelo.

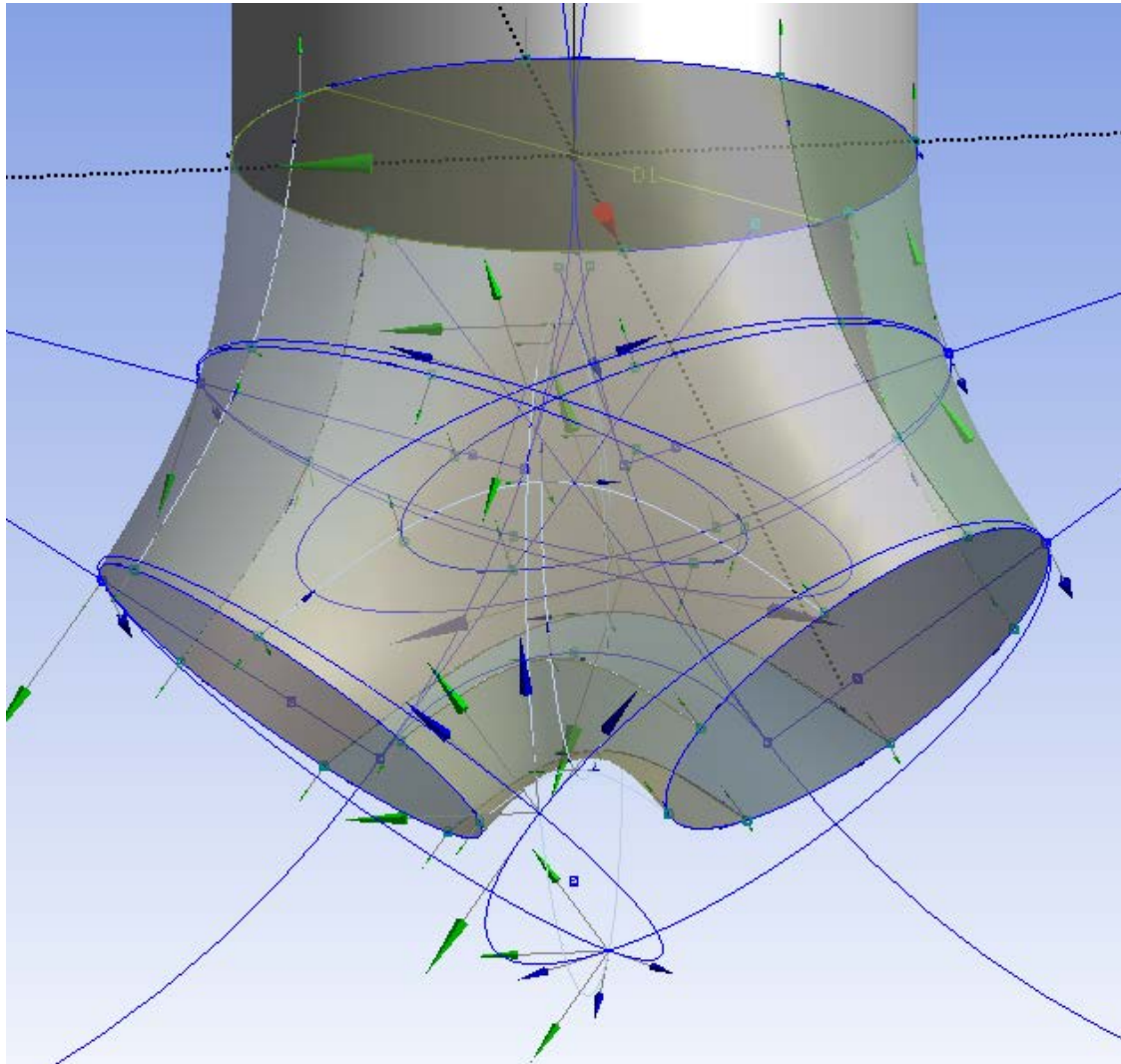


Figura 4.28: Detalle del volumen de la bifurcación encerrado completamente por las superficies creadas.

Seleccionando estas superficies creamos el volumen y lo unimos al resto de la geometría del pulmón.

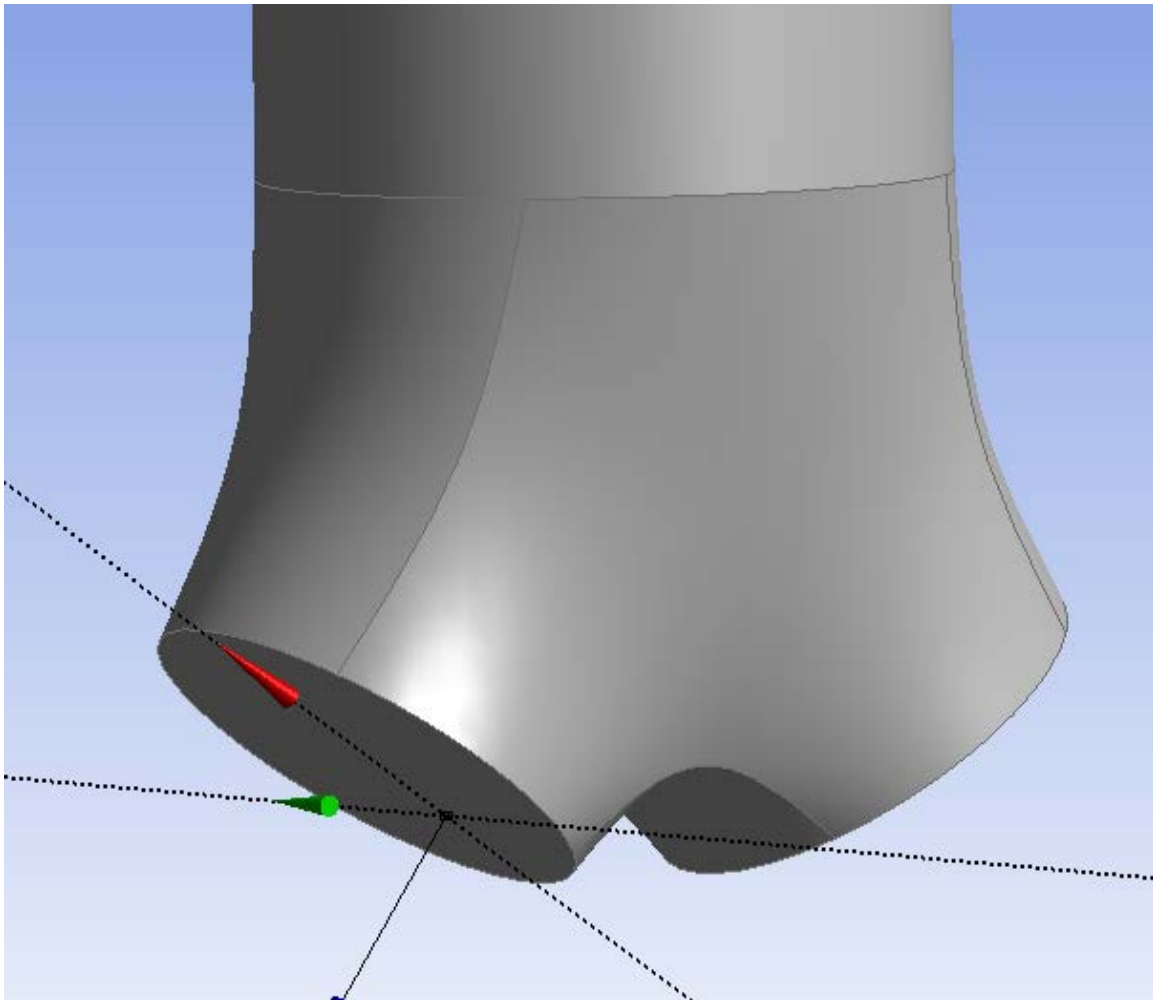


Figura 4.29: Generación del volumen de la bifurcación a partir de las superficies de contorno.

A partir de aquí se repite el proceso tomando como superficie inicial una de las dos superficies de salida. En esta superficie se crea un plano de trabajo sobre el que se realiza el boceto de una circunferencia del mismo diámetro de la salida, ya sea restringiendo la geometría acotando el diámetro y asociándolo al parámetro correspondiente, o haciéndolo coincidir con la geometría anterior. A continuación se realiza una extrusión para obtener el siguiente tramo de pulmón. La longitud de esta extrusión se asocia al parámetro correspondiente.

Hay que tener en cuenta que el plano de cada bifurcación será perpendicular al plano de la bifurcación anterior. Esto es así porque se sigue la regla propuesta

por Kitaoka et al. (1999). En cualquier caso, el ángulo de giro de un plano de bifurcación con el anterior podría ser igualmente parametrizado.

Este proceso de modelado de las vías aéreas se repite hasta alcanzar la generación 17, es decir, toda la zona conductiva de las vías aéreas respiratorias. Una vez completado el modelo, es posible obtener cualquier modelo derivado del mismo simplemente modificando los parámetros. Para ello solo habrá que editar la hoja Excel, o la tabla de parámetros si se ha recogido la información del modelo directamente en Workbench.

Igualmente pueden crearse modificadores para un grupo de parámetros, como por ejemplo, un factor que actúe sobre los diámetros de todo el modelo, obteniendo reducciones de los diámetros del modelo o parte del mismo en un determinado porcentaje. Esta modificación puede simular el efecto de enfermedades obstructivas crónicas de diferente consideración.

Otra ventaja de trabajar con modelos paramétricos a la hora de estudiar el flujo de aire en los pulmones, es la posibilidad de fijar unos puntos de diseño, es decir, una combinación determinada de parámetros para el modelo. Con esto se puede realizar de forma iterativa la simulación para cada punto de diseño o conjunto de parámetros. Tras cada iteración se recogen los resultados de cada simulación, por lo que es posible hacer una comparación de los resultados, entendiendo cómo afectan los cambios del modelo a la solución final. Todo esto, una vez ajustado debidamente, se realizaría automáticamente sin intervención del usuario.

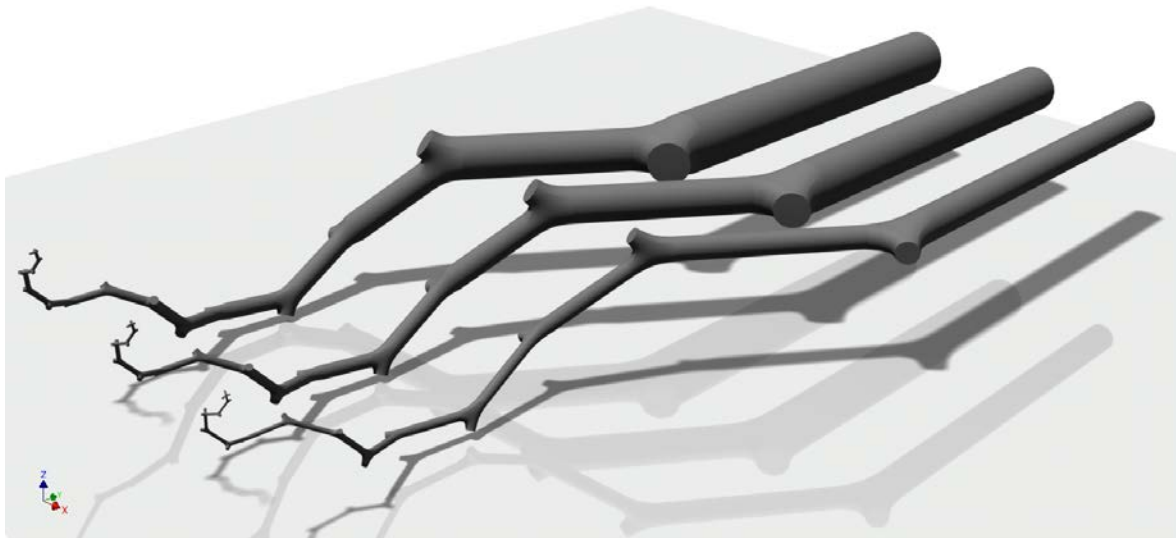


Figura 4.30: Ejemplo del modelo de vías aéreas siguiendo una única dirección con el diámetro original y reduciendo el diámetro al 80 y 50%.

Por último, para completar el modelo, se añadieron las vías altas respiratorias del pulmón: nariz, fosas nasales, faringe y laringe. Para adaptar esta parte de la geometría, importada de los modelos anteriores y no parametrizada, se adaptó el diámetro de conexión con la tráquea para que variara al modificar la luz de la misma.

4.3 Resultados

Las técnicas de modelado paramétrico nos permiten disponer de un modelo tridimensional de las vías aéreas respiratorias cuyos parámetros definitorios pueden modificarse para obtener diferentes resultados en un estudio fluidodinámico del movimiento del aire en su interior.

El modelo elegido para ser parametrizado es un modelo simétrico de Weibel para un único camino (modelo de Walters 2010) desde la tráquea a la generación 17 en el que se han parametrizado la longitud y los diámetros de las ramas y los ángulos de bifurcación.

El uso de la parametrización en un modelo CFD para el estudio del pulmón ha supuesto una reducción sustancial en los tiempos de modelado a la hora de estudiar la influencia de ciertas variaciones de la morfología de los conductos respiratorios sobre el paso del aire por los mismos, como podrían ser ciertas enfermedades obstructivas crónicas como el enfisema o la bronquitis.

Es posible extender la parametrización a otras características morfológicas del pulmón como puede ser la disposición de bifurcaciones asimétricas, ángulos variables para cada bifurcación, ángulos entre planos de bifurcaciones, etc...

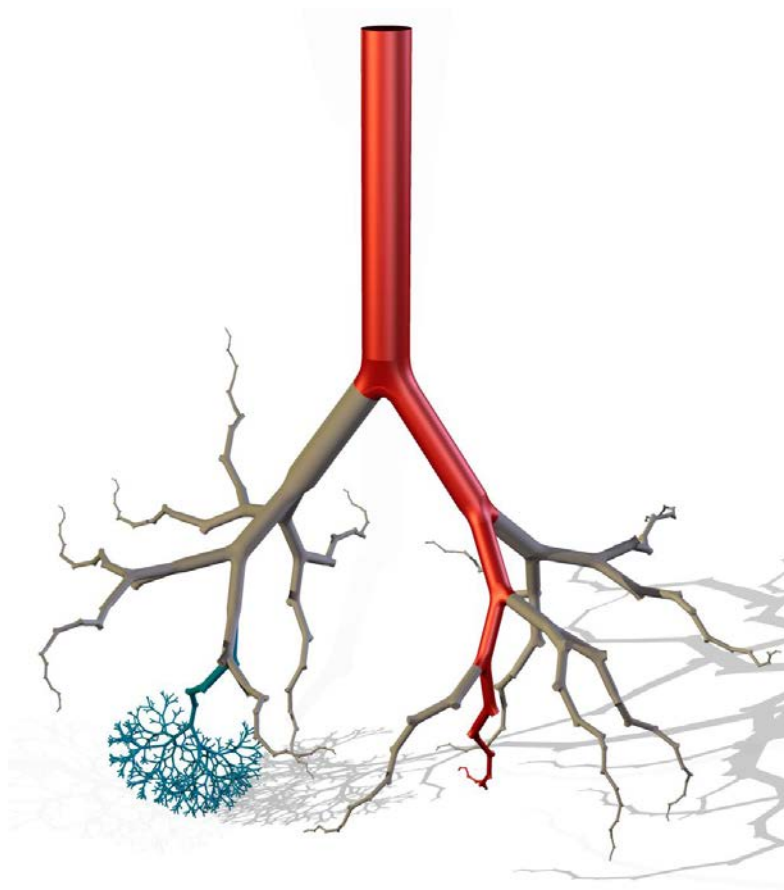


Figura 4.31: Ilustración explicativa del modelo numérico creado. El objeto parametrizado son los conductos representados en rojo. Sin embargo, teniendo en cuenta la simetría del modelo (modelo de Weibel), y aplicando las adecuadas condiciones de contorno en las salidas truncadas de cada bifurcación (modelo de Walters), el resultado es el de obtener la información fluidodinámica para cualquiera de las ramas. Observando la zona azul se puede intuir la complicidad de modelo si se modelara al completo.

5. APLICACIONES PRÁCTICAS DEL MODELO

5. APLICACIONES PRÁCTICAS DEL MODELO

Una vez obtenido el modelo paramétrico tridimensional del árbol bronquial se continúa con el proceso de trabajo de las técnicas de dinámica de fluidos computacional con la finalidad de realizar una simulación numérica con el modelo que permita validar su utilidad para este fin.

5.1. Modelo numérico

Tras obtener la geometría deseada a partir de los parámetros especificados en el modelo paramétrico, el siguiente paso es preparar el modelo para poder simular el paso del aire a través del pulmón. Hay que tener en cuenta que lo que se ha modelado en el capítulo anterior es el volumen que ocupa el aire en las vías aéreas pero no los conductos en sí. Se trata de estudiar el comportamiento del flujo de aire en ese volumen de control.

5.1.1. Mallado

La resolución numérica del movimiento del aire en las vías respiratorias exige la definición de una discretización del problema y del uso de un método de resolución.

El método de resolución del problema se basará en un cálculo por volúmenes finitos, por lo que el primer paso para conseguir la simulación será realizar el mallado del volumen fluídico a estudiar.

El mallado consiste en la discretización espacial del volumen de control para resolver las ecuaciones que rigen el comportamiento del fluido en cada punto. Como se explicó con anterioridad, este punto es de vital importancia, puesto que de la correcta definición de la malla del modelo depende la validez del resultado obtenido.

Una de las cuestiones a tener en cuenta es el tipo de celda a usar. En el caso del modelizado de las vías aéreas, debido a su extrema complejidad, el tipo de celda más apropiada es la tetraédrica que, a pesar de generar un mayor número de elementos, se adapta mejor a geometrías complejas.

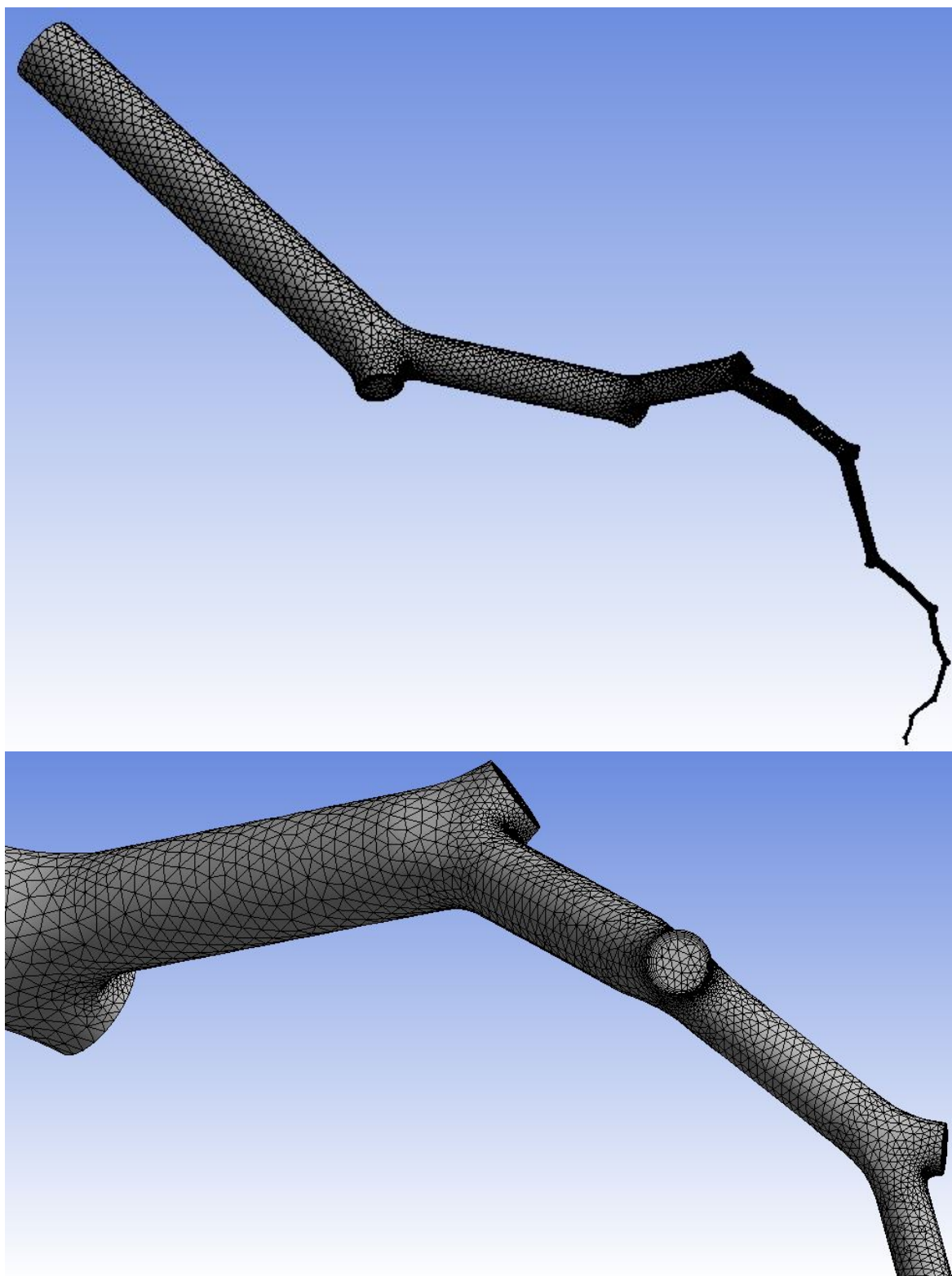


Figura 5.1: Detalle general del mallado del modelo paramétrico.

El número de celdas a emplear, por consiguiente el tamaño, se ha elegido como compromiso entre la exactitud del cálculo realizado y la velocidad de resolución del problema. El tamaño de las celdas varía entre 4.45×10^{-1} y 5.45×10^{-4} mm³.

Para recoger el efecto de la capa límite en el modelo, se ha optado por usar celdas de menor tamaño en las proximidades de las paredes de los bronquios. Para ello se ha creado una capa estructurada de celdas ordenadas en la dirección del flujo que recogerán con mayor precisión las variaciones de velocidad del aire en esta zona derivadas del contacto con las paredes de los conductos. A continuación se muestra un detalle de este mallado, que puede observarse en los bronquios truncados o al realizar secciones del modelo. En la figura 5.3 se presenta una sección de un tramo recto del modelo y de una bifurcación, donde se observa el diferente mallado de las zonas junto a las paredes del pulmón.

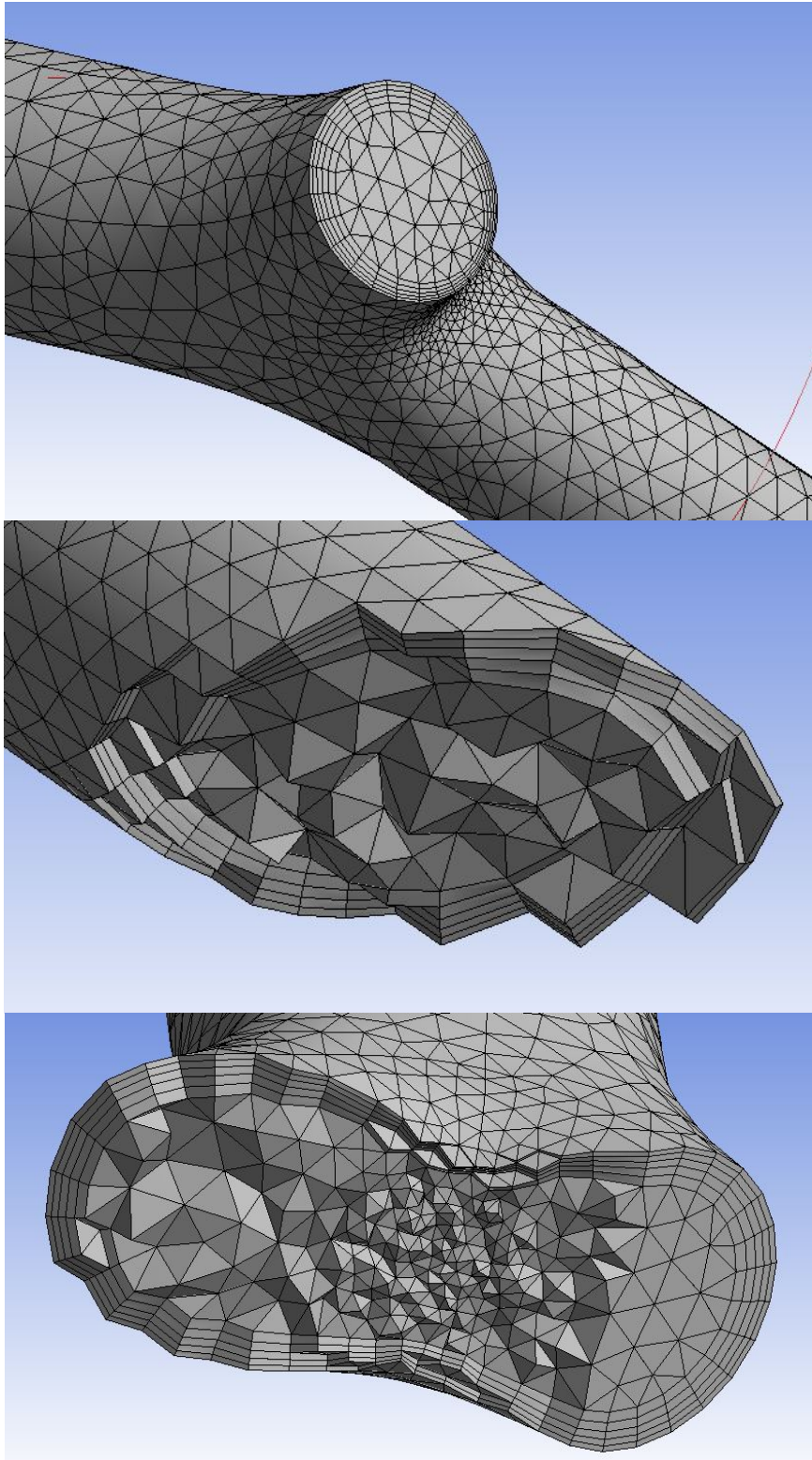


Figura 5.2: Detalle de las celdas empleadas para recoger el efecto de la capa límite.

El mallado debe poder ser recalculado automáticamente para cualquier variación del modelo a partir de los parámetros del mismo. En la figura 5.3 se puede observar cómo se conserva el mallado para diferentes diámetros en una sección del modelo.

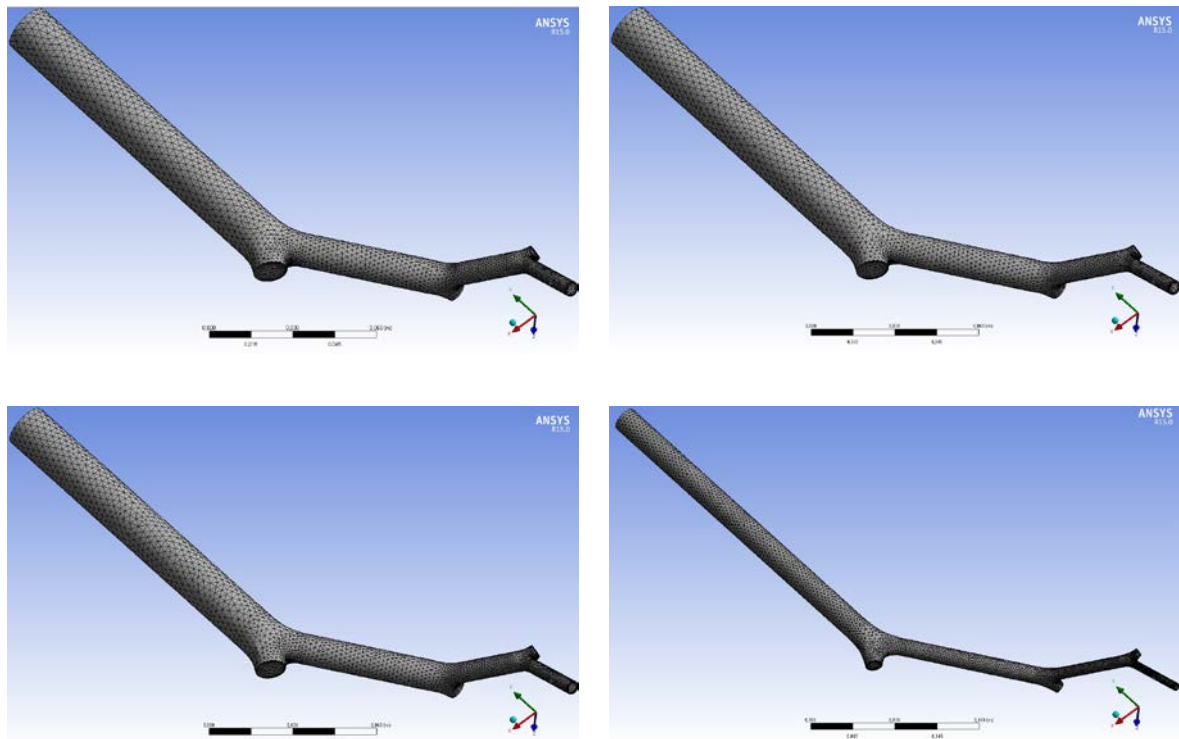


Figura 5.3: Mallado del modelo paramétrico con diferentes valores para los diámetros de las ramas.

5.1.2. Ecuaciones fluidodinámicas

El fenómeno físico que se pretende estudiar es el flujo de aire a través de las vías aéreas desde la tráquea hasta la generación 17 de los bronquios pulmonares.

Resolver un problema fluidodinámico mediante técnicas de dinámica de fluido computacional mediante el método de volúmenes finitos, implica resolver las

ecuaciones que rigen el movimiento del fluido en cada uno de los elementos, es decir, las celdas en las que hemos dividido nuestro modelo.

Las ecuaciones que gobiernan el movimiento de un fluido son las de Navier-Stokes, conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que se obtienen aplicando los principios de conservación de la mecánica y la termodinámica a un volumen fluido. En este estudio se considera el flujo isoterma y adiabático, por lo que se tendrán en cuenta las ecuaciones que describen la conservación de la masa y la cantidad de movimiento.

En el caso de un fluido incompresible con viscosidad constante las ecuaciones de Navier-Stokes son:

Ecuación de continuidad para flujo incompresible

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0$$

Ecuación de cantidad de movimiento:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla p + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{v}$$

Se trata de un conjunto de ecuaciones diferenciales de segundo orden irresolubles. Las soluciones analíticas para la mismas sólo existen para casos concretos muy concretos por lo que es necesario recurrir al análisis numérico para determinar una solución aproximada.

Otro parámetro a determinar son las características del fluido que circula en el modelo. En este caso se trata de aire en condiciones normales, que será considerado como incompresible y turbulento.

Un fluido puede tener dos tipos de flujos, laminar y turbulento. En un flujo laminar las partículas del fluido se mueve siguiendo trayectorias paralelas, sin entremezclarse. A estas trayectorias se les denomina líneas de corriente y en el caso del flujo laminar presentan una trayectoria suave como se muestra en la figura 5.4. El flujo laminar es propio de fluidos a velocidades bajas o viscosidades altas. En

el caso contrario, fluidos de viscosidad baja, velocidades altas o grandes caudales, el flujo suele ser turbulento.

La turbulencia es un fenómeno físico extremadamente complejo, caótico, cuyo análisis sólo tiene sentido desde un punto de vista estadístico. (J.M.Fernández 2012). Se dice que un fluido desarrolla un flujo turbulento cuando el movimiento del mismo se produce de forma caótica, de manera que las partículas que lo componen se mueve de forma desordenada, formando remolinos (vórtices) periódicos cuyas trayectorias sólo serían predecibles a una cierta escala, a partir de la cual se vuelven impredecibles. Los movimientos turbulentos se caracterizan por su aleatoriedad, vorticidad, difusividad, tridimensionalidad, disipación de energía y altos números de Reynolds. La aleatoriedad está presente en fluctuaciones para todas las variables del fluido: velocidad, presión, temperatura, etc... Debido a esta característica de los flujos turbulentos, es preciso realizar un estudio de los mismos mediante métodos estadísticos que permitan localizar en el tiempo y el espacio estructuras coherentes.

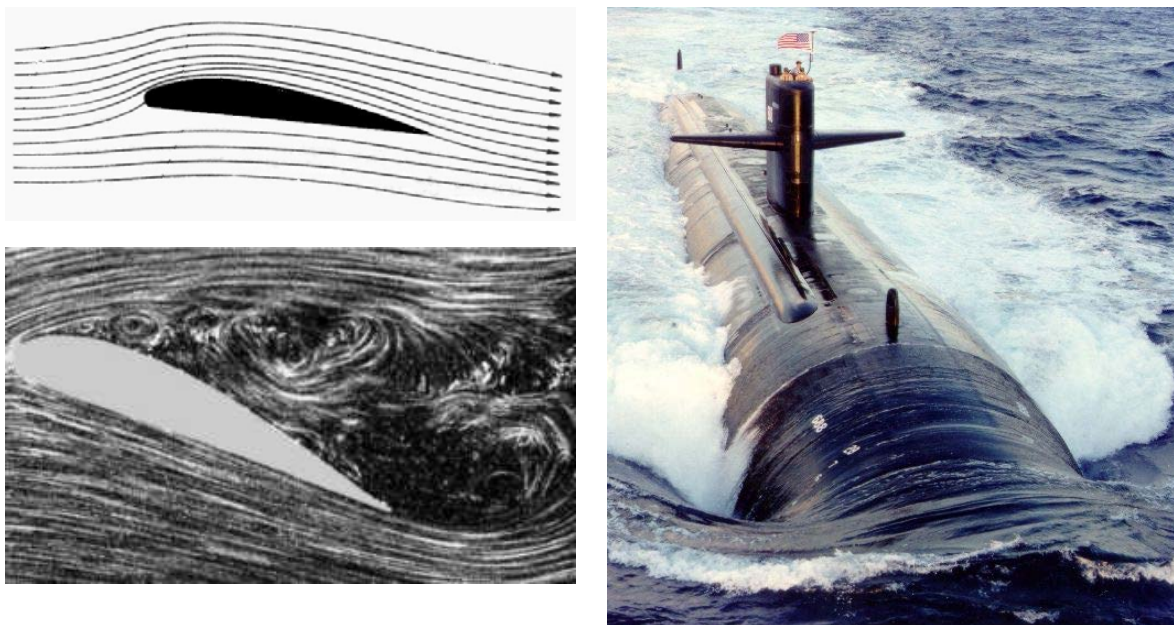


Figura 5.4: Imágenes de la izquierda: Representación de flujos laminar y turbulento. Imagen de la derecha: flujos laminar y turbulento sobre el casco de un submarino. (Wikipedia, <http://www.hnn.navy.mil>).

Existe un punto de inestabilidad que inicia el proceso de amplificación de la perturbaciones que desembocan en la estructura caótica final, que es el flujo turbulento. Para determinar este punto y, por tanto, si el flujo es laminar o turbulento, se utiliza el número de Reynolds, que compara los términos convectivos con los términos viscosos de las ecuaciones de Navier-Stokes que gobiernan el movimiento de los fluidos. Para una tubería viene dado por:

$$Re = \frac{\rho v D}{\mu}$$

dónde:

ρ : Densidad del fluido

v : Velocidad del fluido

μ : Viscosidad dinámica del fluido

D: diámetro del conducto por el que circula el fluido.

Un fluido se comporta de forma turbulenta para valores del número de Reynolds superiores a 400-2000. La mayoría de los problemas que deben resolver científicos e ingenieros se refieren a flujos turbulentos.

A pesar de la aleatoriedad del movimiento de las partículas en un fluido turbulento, es posible estudiar sus variables desde un punto de vista estadístico. Sin embargo, al obtener las ecuaciones de gobierno del fluido a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes, aparecerán más incógnitas que ecuaciones disponibles. Para resolver este problema se utilizan los denominados modelos de turbulencia.

No existe un modelo de turbulencia universal por lo que habrá que elegir uno que se adecue a las características del problema fluidodinámico a estudiar.

Nombre	Nº de ecuaciones adicionales	Características
<i>Modelo Spalart-Allmaras</i>	Modelo de una ecuación	Diseñado especialmente para aplicaciones aeroespaciales, que impliquen flujos con altas velocidades en los contornos de pared
<i>Modelo K-ε Standard</i>	Modelo simple de dos ecuaciones	Robusto y conveniente para iteraciones iniciales
<i>Modelo K-ε RNG</i>	- Variante del modelo <i>K-ε Standard</i> - Tiene un término adicional en la ecuación ϵ .	Preciso para flujos rápidamente deformados y turbulentos
<i>Modelo K-ε Realizable</i>	- Variante del modelo <i>K-ε Standard</i> - Nueva formulación para la viscosidad turbulenta - Nueva ecuación de transporte para ϵ .	Preciso para predecir chorros planos y cilíndricos. Recomendado para flujos con capa límite bajo fuertes incrementos de presión adversos, flujos con separación y recirculación
<i>Modelo K-ω Standard</i>	Resuelve para <i>K-ω</i> ω =valor de disipación específica (ϵ/K) - Modelo de dos ecuaciones	Recomendado para flujos con bajo nº de Reynolds, contornos de pared, capa límite y flujos no estacionarios.
<i>Modelo K-ω SST</i>	- Modelo variante de <i>K-ω Standard</i> - En la región cerca de la pared se comporta como <i>K-ω</i> - En la corriente libre se comporta como <i>K-ε</i>	Más exacto y fiable para un mayor número de tipos de flujo, como incrementos de presión adversos en perfiles aerodinámicos, ondas de choque transitorio, etc.
<i>Modelo Tensiones de Reynolds</i>	- Modelo de siete ecuaciones - Evita la formulación isentrópica de la viscosidad turbulenta	Conveniente para flujos tridimensionales complejos con una elevada turbulencia y rotación. Requiere de mucho tiempo de cálculo y capacidad de memoria.

Figura 5.5: Modelos de turbulencia en ANSYS Fluent y sus aspectos relevantes. (C.J.Quispe 2010).

Para el estudio numérico planteado, se supone el flujo de aire en las vías aéreas humanas tanto laminar como turbulento. Por ello se ha elegido un modelo de turbulencia $k-\omega$ SST que es el que mejor se adapta a esta condición ya que se trata de un modelo híbrido que resuelve la región cercana a las paredes mediante el modelo $k-\omega$, mientras que la regiones distante de estas aplica el modelo $k-\epsilon$.

Los flujos turbulentos están afectados considerablemente por la presencia de las paredes. En estas zonas, las escalas turbulentas son tan pequeñas, que para poder recoger las variaciones en el fluido que allí se producen es necesario aumentar la discretización del problema, es decir, el número de celdas. En flujo laminar, la distribución de velocidades en una sección recta seguirá la ley de

variación parabólica donde la velocidad máxima tiene lugar en el eje de la tubería y es el doble de la media, mientras que en el flujo turbulento la distribución es más uniforme, como puede apreciarse en la figura 5.6. Este es el motivo por el que se ha variado el tipo y tamaño de las celdas en la zona en contacto con las paredes del modelo.

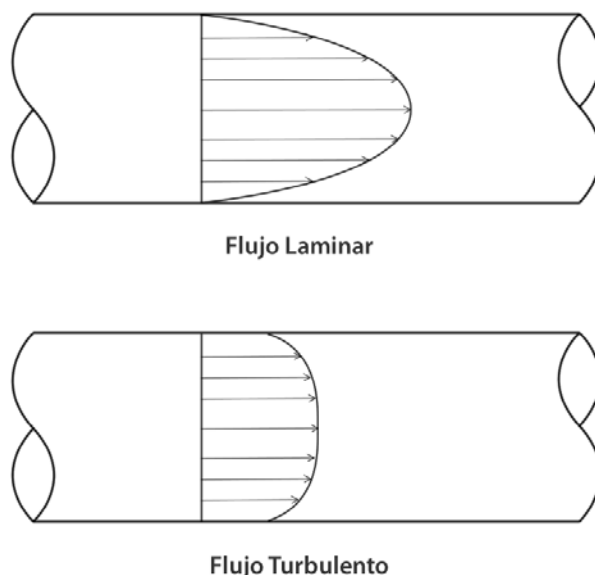


Figura 5.6: Diferencias en el perfil de velocidades entre el flujo laminar y el turbulento. (<http://www.textoscientificos.com>)

5.1.3. Condiciones de contorno

La condición de contorno en la entrada es la presión atmosférica y en la salida, los bronquios, la presión es negativa en la inspiración y positiva en la expiración.

Como se ha explicado con anterioridad, para la simulación del flujo de aire en los pulmones se está siguiendo una estrategia similar a la utilizada por Walters et al. (2010). Para poder simular el pulmón en toda la zona conductiva sin la necesidad de modelizar por completo todas las vías respiratorias, se ha generado un modelo que representa un único camino desde la tráquea hasta uno de los bronquios terminales de la última generación. En cada bifurcación nos encontramos con un segmento de bronquio truncado y otro que continua con el modelo. Ambos tienen la misma forma

debido a que se trata de un modelo simétrico tipo Weibel. Para poder simular este modelo teniendo en cuenta un único camino, las condiciones de contorno para la superficie que se obtiene en el segmento truncado deberán ser las mismas que en una superficie definida en el bronquio no truncado de su misma generación. Estas superficies, simétricas a las anteriores deben ser creadas en el modelo. Para obtenerlas simplemente se dividió el volumen del modelo en segmentos conectados por estas superficies internas como puede apreciarse en la figura 5.7.

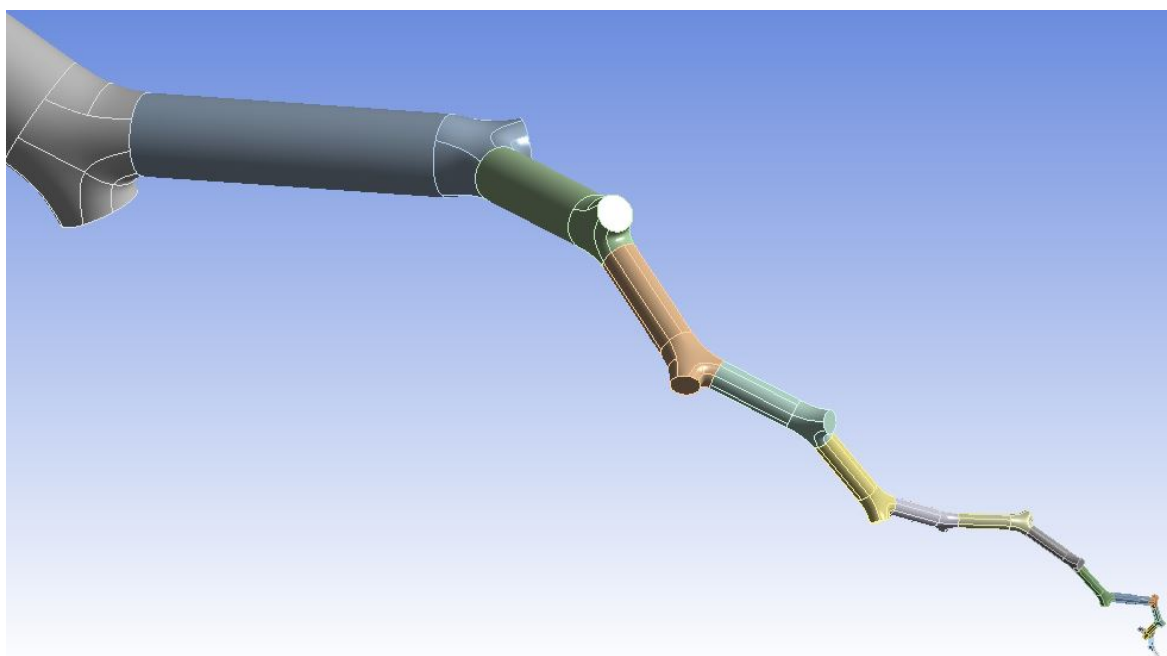


Figura 5.7: División del modelo en segmentos para obtener las superficies intermedias en las que aplicar la UDF.

Esta condición de contorno ha sido implementada mediante una función de usuario del programa (UDF - User-Defined Function) que tras cada iteración, toma los valores del perfil de velocidad de la superficie simétrica creada en el tramo no truncado y los copia en la superficie, simétrica, del bronquio truncado. Hay que tener en cuenta que no se trata de una velocidad media, sino de un perfil de velocidades, que adquiere su máximo valor en el centro del conducto y es cero junto a la pared. Para el correcto funcionamiento de este algoritmo, es necesario nombrar las caras truncadas y las internas asociadas a éstas, con un nombre e índice determinado

que reconoce la UDF. El algoritmo que describe esta UDF puede encontrarse en el anexo II de este trabajo y ya fue probado previamente en anteriores trabajos con modelos no paramétricos (Fernández 2014).

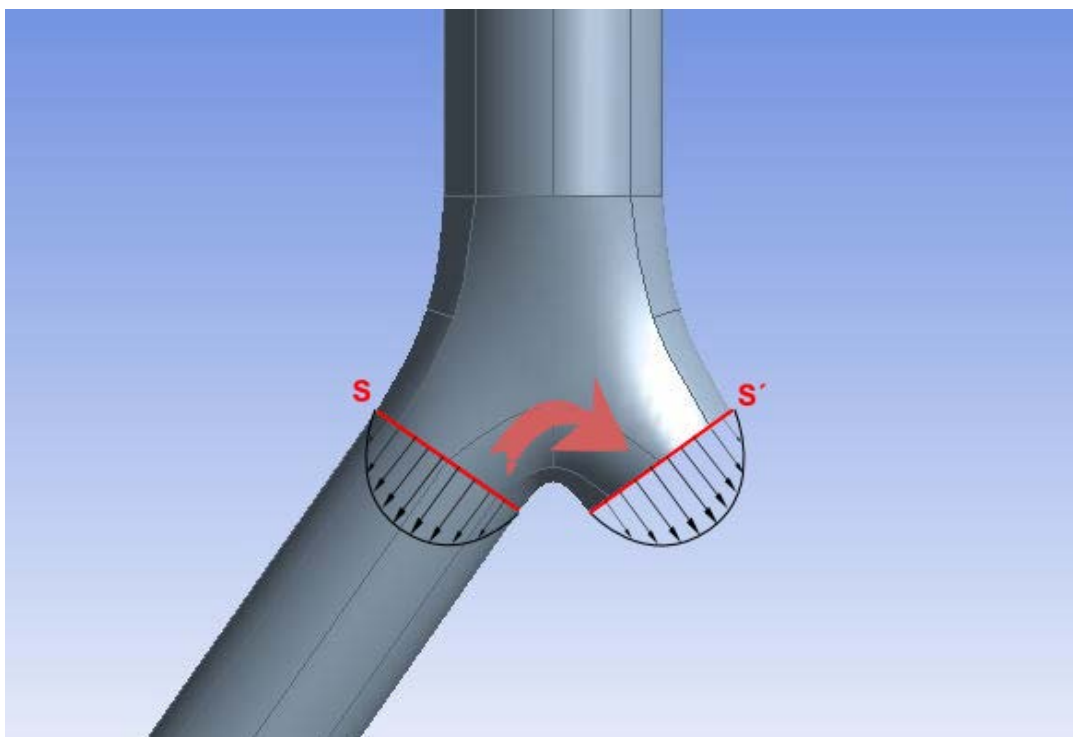


Figura 5.8: Esquema explicativo de la aplicación de las condiciones de contorno para la simplificación del modelo mediante un único camino.

5.1.4. Parámetros de cálculo

El cálculo numérico se ha realizado con ANSYS Fluent 15 para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes (URANS - Unsteady Reynolds-averaged Navier-Stokes) con los siguientes ajustes:

- Pressure-based and implicit with an absolute formulation for the velocity fields
- Esquemas de segundo orden para la discretización espacial y temporal de las derivadas.
- Discretización “Standard” para la presión.
- Algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations, Patankar 1972) de resolución.

Se fija un caudal de entrada en la superficie de entrada del modelo (tráquea o boca) y una presión constante en la salida del bronquio de la última generación.

El programa usa un método iterativo para encontrar una solución aproximada al problema partiendo de un resultado inicial, que suele fijarse en 0, y que se aproxima al resultado final con cada iteración. Las diferentes soluciones aportadas con cada iteración por el programa deben ir convergiendo hacia la solución real de manera que el proceso terminará, aunque no se hayan realizado todas las iteraciones prefijadas, cuando la diferencia entre ambas sea menor que un determinado valor. En este caso se fijó ese valor a 10^{-5} .

5.2. Validación del modelo

Una vez configurado el modelo a través de sus parámetros, discretizado el problema con el mallado del mismo y fijado las variables de contorno se procede al cálculo. El programa inicia el proceso iterativo comentado anteriormente y finaliza con un mensaje cuando se ha alcanzado el valor de los residuos estipulado, si no hubiera ningún problema. Se dice entonces que se ha conseguido la convergencia.

Una vez realizado el cálculo, el último paso del proceso CFD será el de analizar los resultados. Esta parte es conocida como *post-proceso*. Para realizar un análisis completo y detallado del problema y poder sacar conclusiones del mismo, es preciso diseñar correctamente la manera en que se visualizará el flujo. De esta forma disponemos de visualización de las líneas de corriente, contornos de velocidades, campos vectoriales, e incluso animaciones que pueden obtenerse de todo el volumen de control o de una parte, ya sea en 3D o a partir de planos o superficies 2D previamente preestablecidas. Igualmente es posible obtener gráficas a partir de los datos obtenidos en la simulación que representen multitud de variables físicas del problema.

Por tanto, lo que se obtiene al terminar la simulación del problema fluidodinámico es una extensa base de datos con las características físicas del flujo.

A continuación se muestran diferentes imágenes que recogen información sobre el comportamiento del fluido para un conjunto de parámetros determinado y unas determinadas condiciones de contorno. El caso concreto que se desee

estudiar determinará la importancia de utilizar unas u otras formas de visualización del flujo.

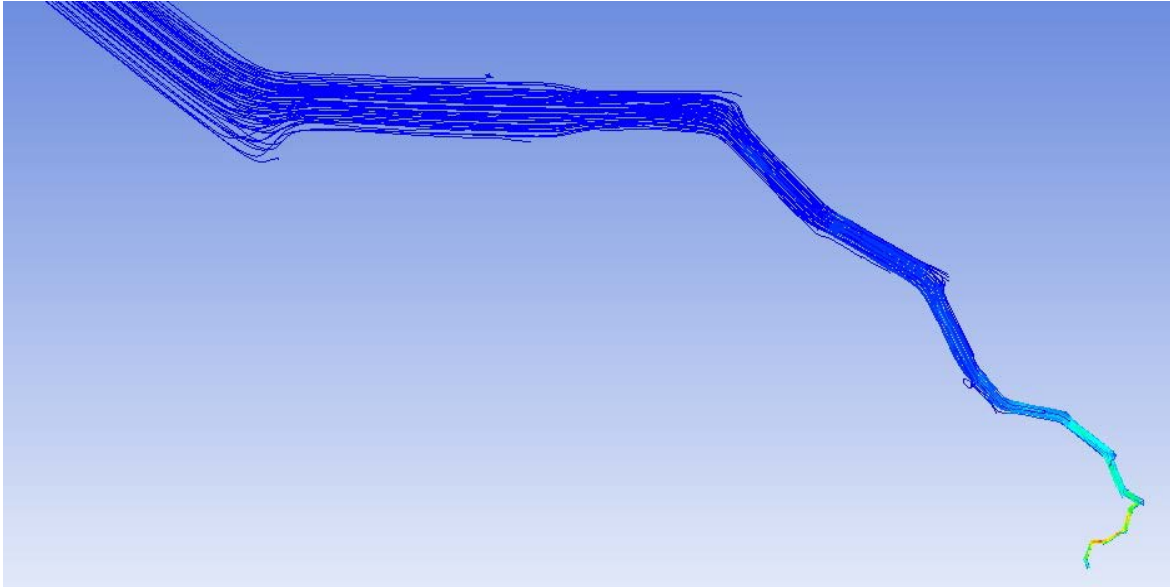


Figura 5.9: Visualización de las líneas de corriente (Path lines) en una sección del modelo en el que los colores representan la velocidad del flujo como prueba del correcto paso del aire en el modelo.

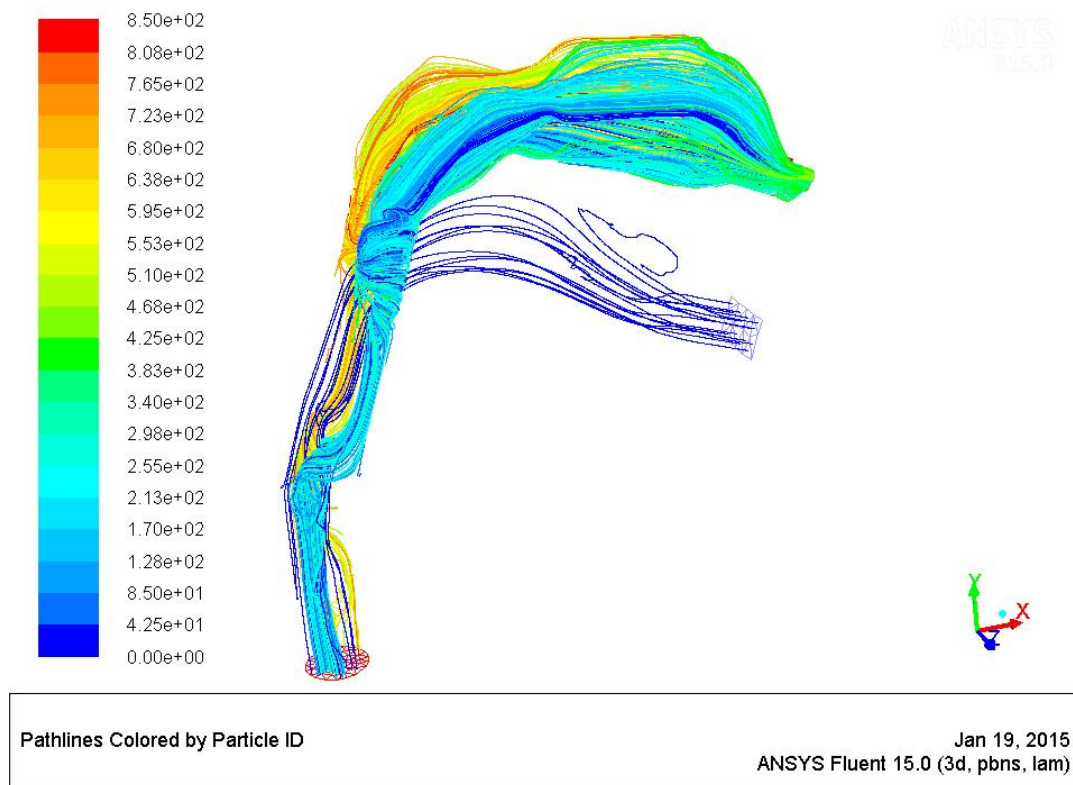


Figura 5.10: Imagen de las líneas de corriente diferenciadas por colores en su paso por las vías aéreas altas.

Tras realizar la simulación y visualizar y estudiar los resultados para un conjunto de parámetros del modelo paramétrico, es posible estudiar la influencia de un cambio en la geometría del mismo con solo modificar los parámetros iniciales y repetir el proceso. En este caso el uso de un modelo paramétrico permite ahorrar tiempo y esfuerzo, así como asegurar que no se cometan nuevos fallos en la edición de estas modificaciones. La ventaja de estas técnicas va aún más lejos. El conjunto de parámetros que definen una geometría concreta del modelo pueden agruparse en los denominados “puntos de diseño”. Agruparlos de esta forma permite que el proceso CFD completo para diferentes grupos de parámetros pueda repetirse sin necesidad de intervención del usuario. Configurando adecuadamente la salida del proceso (postproceso) pueden obtenerse automáticamente relaciones entre diferentes valores para los parámetros del modelo. Así se pueden obtener gráficas que muestren la variación de una determinada magnitud física del modelo numérico para diferentes valores de una determinada característica geométrica del mismo.

Cuando se trata de parametrización de un modelo en un proceso CFD el alcance de los parámetros no abarca sólo las diferentes relaciones geométricas que definen el modelo. En el momento de definir los parámetros de un punto de diseño es posible modificar, además de los parámetros geométricos creados, características de la malla creada, características del flujo como densidades, temperaturas, etc.. y otras condiciones de contorno como la velocidad de entrada, presiones, etc...

El éxito resolviendo un determinado problema numérico, mediante un proceso CFD, cuando tratamos con modelos paramétrico pasa por diseñar correctamente los puntos de diseño que se quieren estudiar que darán una información cualitativa y cuantitativa excelente a la hora de estudiar la influencia de cada parámetros en el desarrollo normal del flujo.

En el caso del trabajo de la presente tesis, disponer de un modelo paramétrico del pulmón humano permite diseñar puntos de diseño que modifiquen los diámetros del modelo para simular distintos grados de obstrucción del pulmón sin necesidad de rehacer el modelo tras cada simulación.

5.3. Conclusiones

En el presente capítulo se ha mostrado la utilidad del modelo paramétrico presentado. El modelo ha demostrado ser mallable y, bajo determinadas condiciones de contorno, permite estudiar el flujo de aire en su interior. Los estudios numéricos realizados en los modelos no paramétricos realizados previamente, pueden trasladarse a este modelo, con la ventaja de que en éste es posible realizar variaciones de la geometría de forma sencilla con el fin de obtener diferentes resultados que muestren la relación entre ambos.

6. CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE TRABAJO

6. CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE TRABAJO

En este capítulo se muestran los objetivos alcanzados con el desarrollo de este trabajo y se hace una reflexión sobre la utilidad del modelo obtenido.

Por último, se presentan las líneas de trabajo que se abren a partir del hito alcanzado con este trabajo.

6.1. Conclusiones

1. En la presente tesis se han estudiado los diferentes modelos propuestos en la bibliografía por otros grupos de investigación. Previamente se han expuesto las principales características del árbol bronquial humano, haciendo notar la extraordinaria complejidad del mismo. Este hecho es uno de los principales motivos por los que la mayoría de autores ha optado por realizar modelos geométricos más sencillos como aproximación a la geometría real del pulmón, ya que de conseguir modelar en su totalidad la misma, la capacidad actual de proceso de los ordenadores impide obtener resultados en un estudio numérico.
2. Para la generación del modelo paramétrico presentado, se han tenido en cuenta consideraciones de varios de estos estudios como son los de Weibel, Horsfield, Kitaoka, o Walters. A partir de estas consideraciones se ha ideado un modelo definido por una serie de parámetros cuya fácil modificación fácilmente permite modificar la geometría del árbol bronquial.
3. Se ha presentado una metodología para llevar a cabo este modelo paramétrico con el software ANSYS 15. El software es de tipo paramétrico basado en la historia, lo que permite un control absoluto de los parámetros del modelo una vez fijados.
4. Junto con el modelo paramétrico se ha implementado un modelo no paramétrico de las vías aéreas altas que ha sido acoplado a la tráquea del modelo paramétrico.

5. Ha sido realizado un estudio fluidodinámico mediante técnicas de dinámica de fluidos computacional. Se ha obtenido la discretización del problema (mallado del modelo) para diferentes diámetros comprobando su buen funcionamiento.
6. La validación del modelo se ha realizado comparando los resultados obtenidos con los estudios CFD previos realizados sobre modelos no paramétricos.
7. El trabajo realizado supone disponer de un modelo paramétrico de diámetros, ángulos y longitudes que permite obtener diferentes modelos que puedan asimilarse cualquier geometría del pulmón.

Se trata de una nueva línea de investigación en la Universidad de Extremadura, de la que en España sólo se conocen tres trabajos previos que estudien mediante dinámica de fluidos computacional las vías aéreas pulmonares. Dos de ellos modelizan las vías respiratorias altas (Casan 2003 y Quispe 2010) mientras que el tercero forma parte de la colaboración entre grupos de investigación de las Universidades de Oviedo, Extremadura junto con el Instituto Nacional de Silicosis (centro nacional de referencia de enfermedades pulmonares) perteneciente al Hospital Universitario Central de Asturias (HUCA), y que también ha dado lugar al presente trabajo.

Realizar un estudio fluidodinámico puede parecer muy sencillo con las nuevas aplicaciones que llegan de las empresas de software dedicado a este fin, sin embargo, aunque obtener un resultado para un determinado problema sea ciertamente sencillo, lo cierto es que conseguir que este resultado sea algo parecido al comportamiento real del fluido es realmente complicado. Para poder simular con éxito el funcionamiento de un sistema que opere con fluidos es necesario saber modelizarlo correctamente, entender cómo funciona la mecánica de fluidos y los métodos numéricos que resuelven el problema y, sin duda, tener conocimiento del sistema en sí, de cuales son las condiciones de contorno y sus particularidades. Es por esto que, para obtener resultados fiables se hace indispensable la formación de

un equipo de personas multidisciplinar. En el caso del estudio de las vías aéreas pulmonares, el Departamento de Energía de la Universidad de Oviedo, el equipo médico del Instituto Nacional de Silicosis y el Departamento de Expresión Gráfica de la Universidad de Extremadura han logrado crear un equipo cuya colaboración está dando sus frutos en el campo de la investigación del funcionamiento fluidodinámico del pulmón humano y del que se deriva el presente trabajo.

El reto de modelizar las vías aéreas pulmonares es una tarea complicada que ha exigido muchas horas de estudio y trabajo. La geometría de pulmón humano, como se ha explicado anteriormente, es muy compleja debido a su estructura fractal e irregular y al gran número de terminales bronquiales de los que dispone.

A la dificultad de generar un modelo geométrico para el estudio numérico, se suma la difícil tarea de parametrizar esta geometría. El hecho de contar con un modelo paramétrico para las vías aéreas humanas va a permitir realizar estudios fluidodinámicos de todo tipo, relacionando las influencias geométricas del modelo sobre los resultados con menor tiempo y esfuerzo. Una de las principales aplicaciones para este modelo será el estudio del depósito de partículas en el pulmón.

Existe, sin duda, una necesidad social de este tipo de estudios. En España se producen 50 muertes diarias por enfermedades obstructivas crónicas y origina un gasto sanitario de 2600 millones de euros anuales.

6.2. Futuras líneas de trabajo

Esta nueva línea de investigación abierta en la Universidad de Extremadura supone un excelente punto de partida para nuevas líneas de trabajo.

- Toma de datos de imágenes CT

Para las dimensiones de los modelos iniciales y para la determinación de las formas geométricas del modelo paramétrico presentado en este estudio, se ha partido de la información recogida en otros estudios sobre las vías aéreas pulmonares. Para obtener una mayor precisión en la definición del problema, se

hace necesario la utilización de imágenes médicas, como la tomografía computerizada y el procesamiento de las mismas.

La obtención de un modelo 3D completo de un sujeto mediante técnicas CT es muy interesante de cara a estudiar las características geométricas del árbol bronquial pero desde el punto de vista de un proceso de dinámica de fluidos computacional, como se ha comentado anteriormente, existe la desventaja de trabajar con modelos y mallas complejas que pueden presentar problemas, y de no disponer de la suficiente capacidad de cálculo para llevar a cabo la simulación.

Una aplicación interesante para esta información sería obtener del estudio de esas imágenes los valores para los parámetros del modelo paramétrico de forma automática. De esta manera, de una tomografía obtendremos un modelo listo para el estudio numérico de forma sencilla.

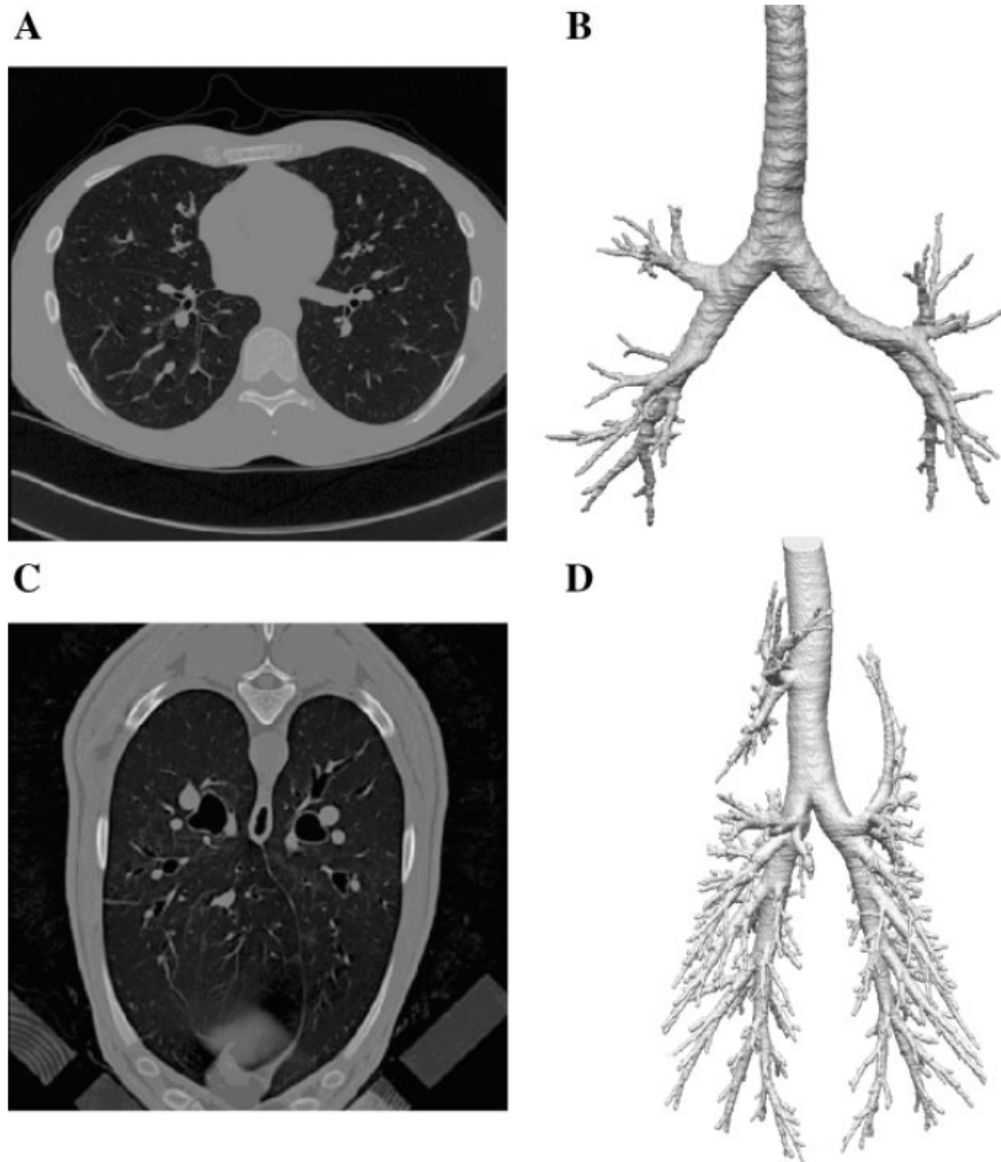


Figura 6.1: Imágenes de tomografías computerizadas. (Tawhai 2004).

- Parametrización de otros aspectos del estudio numérico.

Como se ha comentado, en este modelo se ha parametrizado únicamente los ángulos, diámetros y longitudes, que pueden variarse modificando la hoja de parámetros. Sin embargo este modelo puede modificarse para que recoja otros tipos de valores como ángulos entre planos de dos bifurcaciones. Puede igualmente diseñarse una bifurcación más realista y por tanto con mayor complejidad geométrica que recoja nuevos conjuntos de parámetros.

- Utilización de macros del programa para la generación automática de las bifurcaciones

En el cuarto capítulo de la tesis se ha descrito la metodología seguida para la generación de una bifurcación. En el caso descrito se ha optado por fijar una serie de parámetros que deben quedar fijos por sus dimensiones o restricciones. Este proceso se repite en cada nueva generación, asignando los valores correspondientes de esa generación a los nuevos parámetros.

Si obviamos la nueva denominación del parámetro y su valor, el proceso es exactamente el mismo por lo que sería un gran mejora para el modelo poder automatizar el proceso de generación de la geometría. El software utilizado, como muchos otros de este tipo, permite la generación de macros que automaticen tareas de este tipo.

La automatización de la generación de las bifurcaciones precisa de un estudio geométrico más profundo si cabe de la geometría generada, pero conlleva dos importantes ventajas frente a la edición manual.

La primera ventaja es que evita cometer errores durante la edición del modelo una vez fijado el proceso. Hay que recordar que el tipo de software paramétrico utilizado está basado en la historia del modelo. El más mínimo error en la determinación, ya no sólo de un parámetro dimensional del modelo, sino de una simple restricción de cualquier entidad como una tangencia, paralelismo, etc... puede hacer que al modificar los parámetros para obtener el nuevo modelo, el programa devuelva un error o un resultado no esperado. Fijar el procedimiento de construcción de la geometría con una macro permite salvar este posible (y frecuente) error de parametrización en el modelo que exige muchas horas de depuración del mismo.

La segunda ventaja radica en la posibilidad de realizar otros tipos de geometría y obtener el modelo en menos tiempo. Así, si se decide parametrizar otras partes de la geometría propuesta o realizar una nueva metodología para llegar a una nueva geometría más realista, se diseñaría ésta para ser implementada en esta macro que repitiera el proceso más fácilmente. El método de edición de la

macro sería similar pero atendiendo a una estructura distinta desde el punto de vista geométrico.

- Parametrización de las vías aéreas altas

Se ha utilizado un modelo de vías aéreas altas (fosas nasales, boca y faringe) importado de un estudio anterior y que se adapta al diámetro de la tráquea del modelo paramétrico. Sería posible estudiar, del mismo modo que se ha hecho con el árbol bronquial, las características geométricas principales de éste órganos y seleccionar aquellas partes del mismo que puedan parametrizarse con las ventajas que ello conlleva.

- Uso de técnicas de modelado directo.

Como se ha comentado en un punto anterior, la técnica utilizada obedece a un modelado paramétrico basado en la historia del modelo, que tiene una gran precisión y control sobre los parámetros pero que no permite fallos en las restricciones del modelo para que este sea tolerante con los cambios previstos que puedan efectuarse en el modelo. Una nueva línea de investigación que parta de nuestro estudio podría explorar la posibilidad de utilizar técnicas de modelado directo en la edición del modelo de vías aéreas. En la actualidad existen programas híbridos que utilizan ambos sistemas, modelado paramétrico y directo, que podrían aportar una mayor versatilidad a la hora de realizar cambios en los modelo propuestos. El mismo paquete de ANSYS, en sus últimas versiones ofrece el modelador Spaceclaim que permite operar con esta filosofía de trabajo y que queda incluido en el entorno de trabajo de Workbench y, por tanto, es factible de introducirse en un proceso CFD con ANSYS Fluent.

- Impresión de modelos 3D para estudios experimentales con microPIV.

Anteriormente se comentó la necesidad de realizar aproximaciones y simplificaciones a la hora de abordar problemas de simulación numérica de este tipo. Esta serie de simplificaciones, exige que los resultados obtenidos sean validados posteriormente.

En la biografía pueden verse diferentes formas de validación de los resultados obtenidos por otros grupos de investigación. Podemos ver moldes

obtenidos de pulmones reales, otros fabricados en policarbonato mediante técnicas de control numérico, moldes de silicona, y todo tipo de conductos y sensores de medición.

En estudios previos con modelos no paramétricos y en este último estudio se han comparado los resultados obtenidos con espirometrías de pacientes reales obteniendo unos resultados aceptables.

Pero para hacer una validación más exacta existen técnicas de visualización del flujo que permiten recoger experimentalmente el campo de velocidades y que podrían compararse con los resultados de las simulaciones. Para ello se utilizan equipos PIV (Particle Image Velocimetry). Estos equipos exponen el flujo de un determinado fluido a la luz de un potente láser que ilumina una serie de partículas que son arrastrados por él. Una cámara recoge en dos momentos consecutivos dos instantáneas con la posición de estas partículas de manera que procesando estas imágenes pueda obtenerse el campo de velocidades del fluido.

Esta aplicación para el flujo de aire en los pulmones ya ha sido utilizada por otros autores (Robinson 2006, Oakes 2010, Berg 2011) sobre modelos realizados por técnicas similares a las descritas anteriormente. Estos modelos tienen formas que distan mucho de la geometría real de un pulmón debido a su complicidad, sin embargo, hoy en día existen técnicas de prototipado rápido que permitirían obtener un modelo de las vías aéreas con cierta facilidad como es la impresión 3D.

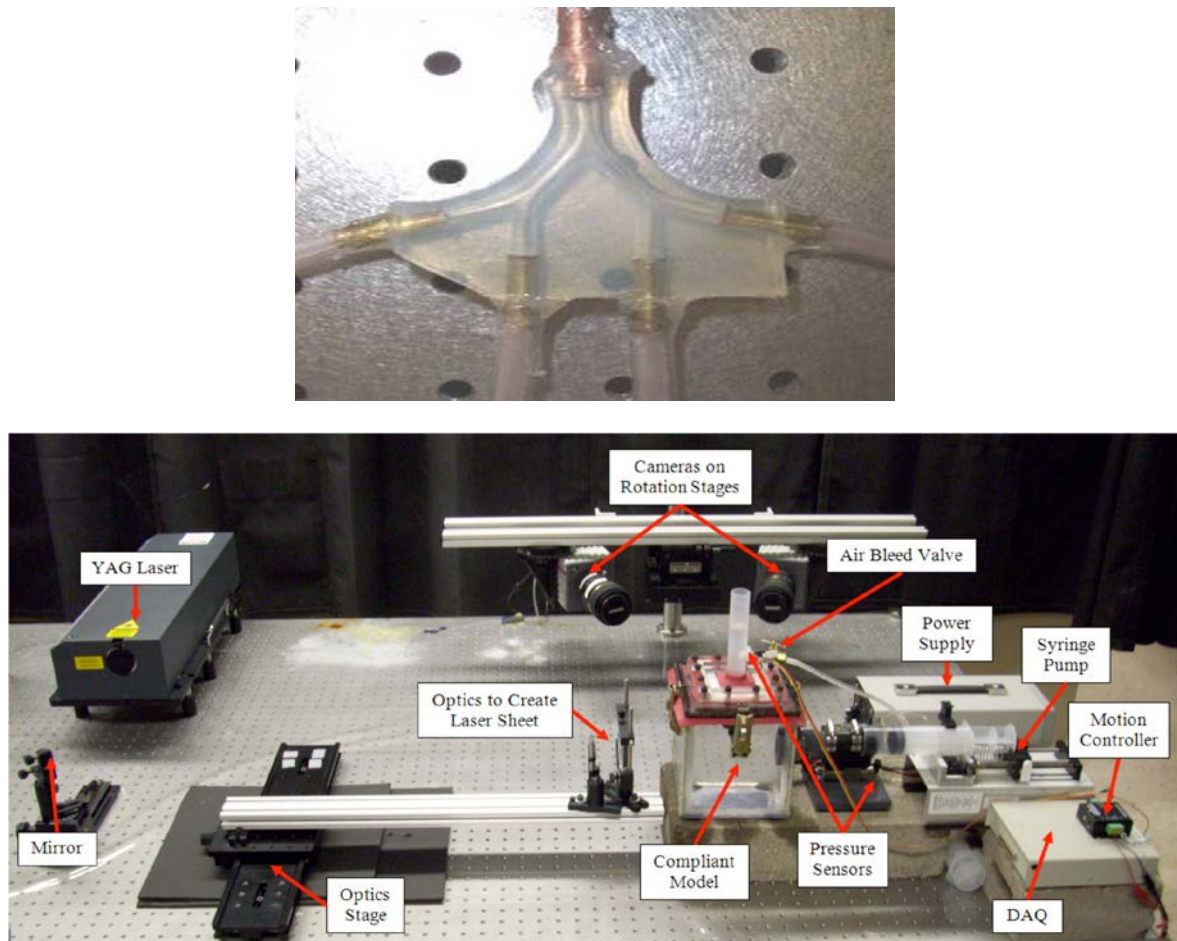


Figura 6.2: Estudio PIV sobre pulmón. (Berg 2011).

A partir de los modelos realizados con el software paramétrico pueden editarse modelos reales mediante impresión 3D en los que acoplar una sección transparente que permita visualizar el flujo con un PIV y validar los resultados obtenidos en las simulaciones.

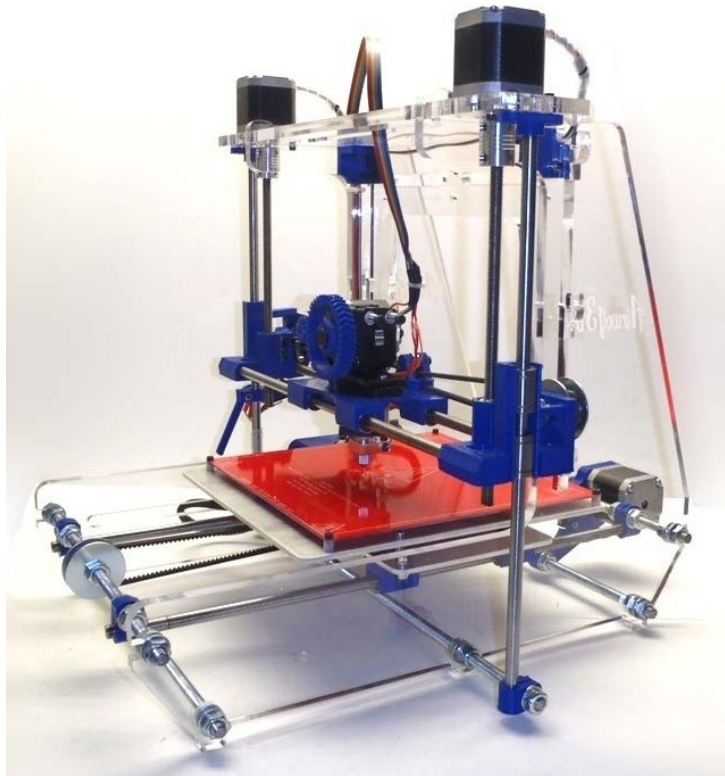


Figura 6.3: Impresora 3D («Airwolf 3d Printer» de Eva Wolf - <http://airwolf3d.com>).

Investigadores del MIT (Massachusetts Institute of Technology) y del Hospital Infantil de Boston han desarrollado recientemente un sistema que puede tomar imágenes por resonancia magnética (MRI) del corazón de un paciente y convertirlo en un modelo tridimensional gracias a la impresión 3D que los médicos puedan tocar para planificar la cirugía. en este caso se trataría de obtener un modelo del pulmón que pueda albergar el paso del fluido y que pueda ser visualizado mediante técnicas PIV.



Figura 6.4 Imagen de un corazón impreso en 3D a partir de imágenes de resonancia magnética. (news.mit.edu).

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA

- Berg E.J., Robinson R.J. Stereoscopic particle image velocimetry analysis of healthy and emphysemic alveolar sac models. *Journal of Biomechanical Engineering* 2011, Vol. 133.
- Burton, R. T., Isaacs, K. K., Fleming, J. S., Martonen, T. B. Computer Reconstruction of a Human Lung Boundary Model From Magnetic Resonance Images. *Respiratory Care* 2004; 49(2):180-185.
- Castro-Ruiz P. Análisis computarizado del flujo aéreo en cavidad nasal. Tesis Doctoral. Universidad Autónoma de Madrid. 2003.
- Centro Nacional de Epidemiología. Ministerio de Sanidad y Política Social. Estrategia en EPOC del Sistema Nacional de Salud. 2009.
- Ertbruggen C., Hirsch C., Paiva M. Anatomically based three-dimensional model of airways to simulate flow and particle transport using computational fluid dynamics. *J Appl Physiol* 2005; 98:970-980.
- European Respiratory Society. European Lung White Book
- Fernández A. Aplicaciones clínicas de modelos de dinámica de fluidos en patología respiratoria. Tesis Doctoral. Universidad de Oviedo. 2014.
- Fernández J.M., Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos. Editorial Reverté, S.A. 2012.
- Freitas RK and Schröder W. Numerical investigation of the three-dimensional flow in a human lung model. *Journal of Biomechanics* 2008; 41:2446–2457.
- Gemci T, Ponyavin V, Chen Y, Chen H and Collins R. Computational model of airflow in upper 17 generations of human respiratory tract. *J. Biomech.* 2008; 41:2047–54.
- Grupo MBE Galicia, Nuñez, M., Penín S., Moga, S. Espirometría forzada. www.fisterra.com, 2004 Espirometría forzada.
- Guan X., Martonen T.B. Flow transition in bends and applications to airways. *J. Aerosol Sci.* 2000, 31; 833.
- Hammersley J.R., Olson D.E. Physical models of the smaller pulmonary airways. *J Appl Physiol* 1992; 72(6):2402-2414.

- Hegedüs, Cs. J., Balásházy, I., Farkas, Á. detailed mathematical description of the geometry of airway bifurcations. *Respiratory physiology & neurobiology*. 2004; 141(1):99-114.
- Horsfield, K., and Cumming, G. Morphology of the Bronchial Tree in Man. *J Appl Physiol* 1968, 24(3):373-383.
- Hyatt, R.E., Wilcox, R. E. The pressure-flow relationship of the intrathoracic airways in man. *Journal of clinical investigation* 1963; 42:29-39.
- Kitaoka H., Takaki R., Suki B. A three-dimensional model of the human airway tree. *J. Applied Physiology* 1999; 87:2207-2217.
- Li, Z., Kleinstreuer, C., Zhang Z. Simulation of airflow fields and microparticle deposition in realistic human lung airway models. Part I: Airflow patterns. *European Journal of Mechanics B/Fluids* 26, 2007, 632–64
- Liu, Y., So, R. M. C., Zhang, C. H. Modeling the bifurcating flow in a human lung airway. *Journal of Biomechanics* 2002; 35(4):465-473.
- Longest P.W., Vinchurkar S. Validating CFD predictions of respiratory aerosol deposition: effects of upstream transition and turbulence. *Journal of Biomechanics* 2007. 40 (2);305-16.
- Luo, H.Y., Liu, Y., Yang, X.L. Particle deposition in obstructed airways. *J. Biomech* 2007; 40(14):3096–3104.
- Ma, B. and Lutchen, K. R. An anatomically based hybrid computational model of the human lung and its application to low frequency oscillatory mechanics. *Annals of Biomedical Engineering* 2006; 34(11):1691-1704.
- Marrero, S.A., Martínez J.M. Estrategia para el diseño paramétrico basado en modelos. *Ingeniería Mecánica*, 3. 2008. 39 - 46.
- Martonen T. On the fate of inhaled particles in the human: a comparison of experimental data with theoretical computations based on a symmetric and asymmetric lung. *Bulletin of Mathematical Biology*, Vol 45, no. 3. 1983.
- Martonen T., Barnett A.E., Frederick J.M., Ambient sulfate aerosol deposition in man: Modeling the influence of hygroscopicity. *Environmental Health Perspectives*. 1985. Vol 63, pp 11-24.
- Monedero J. Parametric Design: a review and some experiences. *Automation in Construction* 9. 2000. 369 - 377.
- Netter F.H. Atlas de anatomía humana. Elsevier Masson 2007.

Nowak, N., Kadake, P.P., Annapragada, A. V. Computational fluid dynamics simulation of airflow and aerosol deposition in human lungs. *Annals of Biomedical Engineering* 2003; 31(4):374-390

Oakes J.M., Day S., Weinstein S.J., Robinson R.J. Flow Field Analysis in Expanding Healthy and Emphysematous Alveolar Models Using Particle Image Velocimetry. *Journal of Biomechanical Engineering*. 2010. Vol. 132.

Quispe C. Estudio del flujo de aire a través de las fosas nasales en la inspiración y espiración, considerando el intercambio de calor existente. Tesis Doctoral. Universidad de Valladolid. 2010.

Raabe O.G., H. Yeh, G.M. Schum, R. F. Phalen. Tracheobronchial geometry: Human, dog, rat, hamster - A compilation of selected data from the project Respiratory Tract Deposition Models. (LF-53) 1976. Albuquerque, NM: Lovelace Foundation for Medical Education and Research.

Robinson, R.J., Oldham, M.J., Clinkenbeard, R.E., Rai, P. Experimental and numerical analysis of a 7 generation human replica tracheobronchial model. *Ann. Biomed. Eng.* 2006, 34(3):373–383

Sauret, V., Goatman, K. A., Fleming, J. S., Bailey, A. G. Semi-automated tabulation of the 3D topology and morphology of branching networks using CT: Application to the airway tree. *Phys Med Biol* 1999; 44(7):1625-1638.

Schmidt, A., Zidowitz, S., Kriete, A., Denhard, T., Krass, S., Pietgen, H. A digital reference model of the human bronchial tree. *Computerized medical imaging and graphics* 2004; 28(4):203-211.

Sera, T., Fujioka, H., Yokota, H., Makinouchi, A., Himeno, R., Schroter, R. C., Tanishita, K. Three-Dimensional Visualization and Morphometry of Small Airways From Microfocal X-Ray Computed Tomography. *Journal of Biomechanics* 2003; 36(11):1587-1594.

Sera, T., Fujioka, H., Yokota, H., Makinouchi, A., Himeno, R., Schroter, R. C., Tanishita, K. Three-dimensional visualization and morphometry of small airways from microfocal X-Ray computed tomography. *Journal of Biomechanics* 2003; 36(11):1587-1594.

Soni, B., Shahrouz Aliabadi. Large-scale CFD simulations of airflow and particle deposition in lung airway. *Computers & Fluids*. 2013. 88: 804-812.

Soriano J.B., Miravittles M. Datos epidemiológicos de EPOC en España. *Arch Bronconeumol.* 2007;43(Supl 1):2-9. - Vol. 43 Núm.Supl.1

- Stapelton KW, Guentsch E, Hoskinson MK, Finlay WH. On the suitability of the κ - ϵ turbulence modeling for aerosol deposition in the mouth and throat: a comparison with experiment. *J Aerosol Sci* 31: 739–749, 2000
- Tawhai M. H., Hunter P., Juerg Tschirren, Reinhardt, J., McLennan, G., Hoffman, E. A. CT-based geometry analysis and finite element models of the human and ovine bronchial tree. *J Appl Physiol* 2004; 97:2310-2321.
- Tawhai, M. H., Burrowes, K. S. Developing integrative computational models of pulmonary structure. *Anatomical record* 2003; 275B(1):207-218.
- Walters, D.K. and Luke, W. H. A method for three-dimensional Navier-Stokes simulations of large-scale regions of the human lung airway. *Journal of Fluids Engineering* 2010; 132(5): 01-1 to 01-8.
- Weibel, E. R. Morphometry of the human lung. Springer-Verlag, 1963.
- Weibel, E. R. What makes a good lung? The morphometric basis of lung function. *SWISS MED WKLY* 2009; 139 (27 – 28): 375 – 386.
- Yang X.L. Respiratory flow in obstructed airways. *J Biomech* 2006; 39:2743–2751
- Yang, X.L., Liu, Y., So, R. M. C., Yang, J. M. The effect of inlet velocity profile on the bifurcation COPD airway flow. *Comput Biol Med* 2006; 36(2):181–194.
- Zhang Z., Kleinstreuer C., Kim C.S. Airflow and nanoparticle deposition in a 16-generation tracheobronchial airway model. *Ann Biomed Eng* 2008; 36:2095–2110
- Zhang, Z., and Kleinstreuer, C. Airflow structures and nano-particle deposition in a human upper airway model. *Journal of computational physics* 2004; 198(1):178-210.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C. Transient airflow structures and particle transport in a sequentially branching lung airway model. *Physics of Fluids* 2002; 14(2):862-880.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C., Donohue, J. F., Kim, C. S. Comparison of micro- and nano-size particle depositions in a human upper airway model. *Journal of Aerosol Science* 2005, 36, 211.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C., Kim, C. Flow structure and particle transport in a triple bifurcation airway model. *Journal of Fluids Engineering* 2001; 123(2):320-330.

ÍNDICE DE FIGURAS

ÍNDICE DE FIGURAS

Capítulo 1: Introducción.

Figura 1.1: Tasa de mortalidad por EPOCs en Europa. (European Lung Foundation).

Figura 1.2: Nivel de conocimiento de la enfermedad en España. (J.B.Soriano 2012).

Figura 1.3: Mapa de mortalidad para los hombres por Comunidades Autónomas. (2006). Tasa ajustada a la población europea/100.000. (Centro Nacional de Epidemiología).

Figura 1.4: Lista de las primeras 15 publicaciones en la categoría de sistema respiratorio en el JCR de 2012. (European Lung Foundation).

Figura 1.5: Tendencias de la llegada de publicaciones a la revista European Respiratory Journal. (European Lung Foundation).

Capítulo 2: Principios teóricos.

Figura 2.1: Esquema del árbol bronquial. (F Netter).

Figura 2.2: Detalle de las vías aéreas altas. (F. Netter / Wikipedia).

Figura 2.3: Tráquea, laringe y bronquios principales. (Wikipedia).

Figura 2.4: Lóbulos del pulmón humano. (F. Netter).

Figura 2.5: Detalle de los alveolos. (Wikipedia).

Figura 2.6: Diferencia entre las vías aéreas de un pulmón normal y otro con las vías obstruidas. (biodic.net)

Figura 2.7: Ilustración del principio universal de un espirómetro. (Wikimedia Commons).

Figura 2.8: Volúmenes pulmonares estáticos. (Raimundo Pastor).

Figura 2.9: Curvas volumen-tiempo y flujo-volumen en una prueba espirométrica. (Grupo MBE Galicia).

Figura 2.10: Curvas volumen-tiempo y flujo-volumen en una prueba espirométrica de un paciente con una patología obstructiva. (Grupo MBE Galicia).

Figura 2.11: Diferentes ejemplos de aplicaciones CFD (www.directindustry.es, BMW Sauber, www.dynamic-fluid-design.com, www.tecnica1.es, www.velominati.com, www.megajoule.pt).

Figura 2.12: Ejemplo de modelo paramétrico. $d_1 = d_0/2$ para valores de d_0 : 10 y 20 mm.

Figura 2.13: Detalle de modelo 3D y árbol de operaciones.

Figura 2.14: Ejemplo de modelo paramétrico y BIM. (solo3d.wordpress.com, web3d.com).

Capítulo 3: Estado del arte.

Figura 3.1: Generaciones y zonas del pulmón. (Weibel 1963).

Figura 3.2: Diferencias entre un modelo de Weibel y otro de Horsfield. (Martonen 1985).

Figura 3.3: Modelo de pulmón de Raabe (1976).

Figura 3.4: Identificación binaria del modelo de Raabe (1976).

Figura 3.5: Ejemplo de bifurcación asimétrica asumida en el modelo de Hammersley y Olson (1992).

Figura 3.6: Modelos asimétricos de Hegedüs et al. (2004) y Schmidt et al. (2004).

Figura 3.7: Algunas de las reglas de la geometría de Kitaoka (1999).

Figura 3.8: Resultado de los algoritmos de Kitaoka (1999) para diferentes grupos de reglas.

Figura 3.9: Resultado final de la aplicación del modelo de Kitaoka (1999).

Figura 3.10: Modelo obtenido por Sera et al. (2003) dónde puede apreciarse los cortes obtenidos en verde así como la línea media generada por el algoritmo en blanco.

Figura 3.11: Modelo de Burton et al. (2004) realizado a través de técnicas MRI.

Figura 3.12: Modelo de Eartbruggen et al. (2005).

Figura 3.13: Vista esquemática del modelo computacional de Luo et al. (2007).

Figura 3.14: Vista del modelo usado por Nowak et al. (2003).

Figura 3.15: Modelo utilizado por Walters et al. (2010).

Figura 3.16: Modelo numérico de Quispe (2010).

Figura 3.17: Comparación de espirometrías reales con resultados numéricos de la simulación CFD del pulmón. (Fernández 2014).

Capítulo 4: Metodología propuesta.

Figura 4.1: Generación de la bifurcación de un modelo en Gambit.

Figura 4.2: Modelo simple de las 3 primeras generaciones realizado con Autocad.

Figura 4.3: Tabla de las dimensiones usadas para las primeras generaciones. (Li et al. 2007).

Figura 4.5: Variación del modelo tipo Weibel de siete generaciones dando curvatura a las ramas.

Figura 4.6: Modelado en Autocad de toda la zona conductiva del pulmón siguiendo estrictamente una geometría de Weibel.

Figura 4.7: Variación del modelo anterior en Autocad de toda la zona

conductiva del pulmón dando cierta simetría al modelo de Weibel.

Figura 4.8: Modelo en Autocad preparado para poder comparar imágenes médicas con un plano de las diferentes generaciones del pulmón.

Figura 4.9: Modelo de geometría de Weibel desarrollado en Gambit para simular el flujo aéreo siguiendo la estrategia de Walters et al. (2010).

Figura 4.10: Inclusión de las vías aéreas altas al modelo Weibel-Walters anterior e importación de las primeras bifurcaciones del árbol bronquial desde un modelo de Autocad.

Figura 4.11: Circunferencia para la generación de la tráquea mediante una extrusión.

Figura 4.12: Generación de un nuevo parámetro para el modelo, en este caso, el diámetro de la tráquea.

Figura 4.13: Edición de la tabla Excel para su conexión con la lista de parámetros.

Figura 4.14: Relación creada en el espacio de trabajo de Workbench entre los módulos de Excel y CFD.

Figura 4.15: Detalle de la lista de parámetros creada en el programa con la importación de la hoja Excel.

Figura 4.16: Generación de la tráquea mediante una extrusión.

Figura 4.17: Esquema de las circunferencias y planos base para la generación de la bifurcación.

Figura 4.18: Trayectorias de giro de la bifurcación.

Figura 4.19: Ángulos para los vectores normales que definen los planos de apoyo de las circunferencias.

Figura 4.20: Arco de apoyo para el “pantalón” de la bifurcación.

Figura 4.21: Plano generado a partir del vector normal creado.

Figura 4.22: Generación de un nuevo plano con una orientación preestablecida.

Figura 4.23: Circunferencias base para la generación de la bifurcación.

Figura 4.24: Circunferencia y plano base para la generación del “pantalón” y divisiones sobre las circunferencias para lograr los puntos de apoyo.

Figura 4.25: Conversión de las líneas de boceto a líneas de construcción.

Figura 4.26: Generación de las líneas 3D restantes que delimitan el contorno de la bifurcación.

Figura 4.27: Superficies de contorno creadas a partir de las líneas de construcción creadas.

Figura 4.28: Detalle del volumen de la bifurcación encerrado completamente por las superficies creadas.

Figura 4.29: Generación del volumen de la bifurcación a partir de las superficies de contorno.

Figura 4.30: Ejemplo del modelo de vías aéreas siguiendo una única dirección con el diámetro original y reduciendo el diámetro al 80 y 50%.

Figura 4.31: Ilustración explicativa del modelo numérico creado.

Capítulo 5: Aplicaciones prácticas del modelo.

Figura 5.1: Detalle general del mallado del modelo paramétrico.

Figura 5.2: Detalle de las celdas empleadas para recoger el efecto de la capa límite.

Figura 5.3: Mallado del modelo paramétrico con diferentes valores para los diámetros de las ramas.

Figura 5.4: Imágenes de la izquierda: Representación de flujos laminar y turbulento. Imagen de la derecha: flujos laminar y turbulento sobre el casco de un submarino. (Wikipedia, <http://www.hnn.navy.mil>).

Figura 5.5: Modelos de turbulencia en ANSYS Fluent y sus aspectos relevantes. (C.J.Quispe 2010).

Figura 5.6: Diferencias en el perfil de velocidades entre el flujo laminar y el turbulento. (<http://www.textoscientificos.com>)

Figura 5.7: División del modelo en segmentos para obtener las superficies intermedias en las que aplicar la UDF.

Figura 5.8: Esquema explicativo de la aplicación de las condiciones de contorno para la simplificación del modelo mediante un único camino.

Figura 5.9: Visualización de las líneas de corriente (Path lines) en una sección del modelo en el que los colores representan la velocidad del flujo como prueba del correcto paso del aire en el modelo.

Figura 5.10: Imagen de las líneas de corriente diferenciadas por colores en su paso por las vías aéreas altas.

Capítulo 6: Conclusiones y futuras líneas de trabajo.

Figura 6.1: Imágenes de tomografías computerizadas. (Tawhai 2004).

Figura 6.2: Estudio PIV sobre pulmón. (Berg 2011).

Figura 6.3: Impresora 3D («Airwolf 3d Printer» de Eva Wolf - <http://airwolf3d.com>).

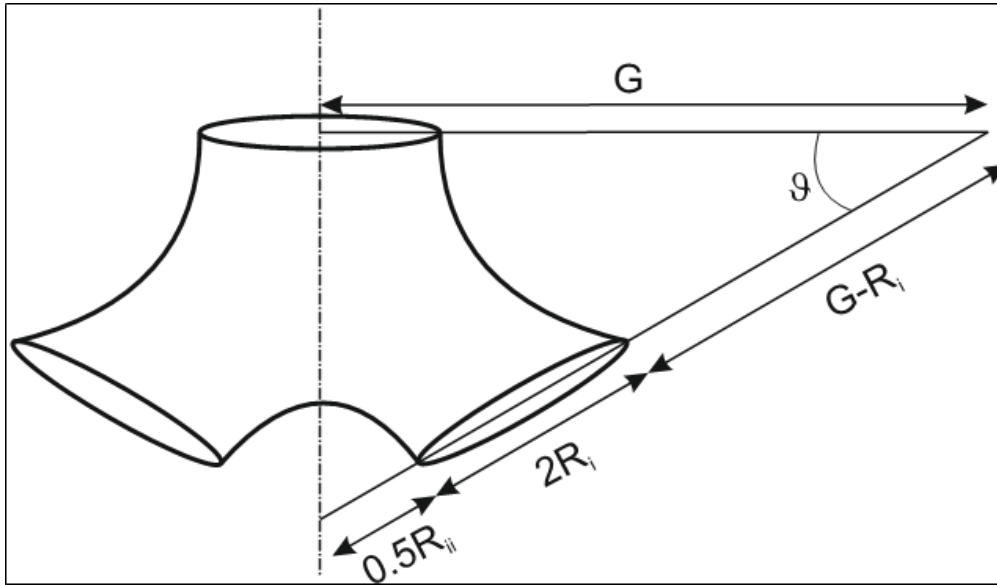
Figura 6.4 Imagen de un corazón impreso en 3D a partir de imágenes de resonancia magnética. (news.mit.edu).

ANEXOS

I. PARÁMETROS DEL MODELO

ANEXO I. PARÁMETROS DEL MODELO.

Listado de los parámetros utilizados para conformar el modelo paramétrico.



Parámetros de partida:

$$d_0 = 0.018 \text{ m}$$

$$L_0 = 0.12 \text{ m}$$

$$d'_0 = 0.013 \text{ m}$$

$$L'_0 = 0.025 \text{ m}$$

Generación de la geometría según las relaciones propuestas por Weibel 1963:

- con $d \leq 3$

$$d = d_0^{-0.388 n}$$

$$L = L_0^{-0.92 n}$$

- con $d > 3$

$$d = 0.013^{-(0.2929 - 0.00624 n) n}$$

$$L = L'_0^{-0.17 n}$$

Relación entre los radios de la bifurcación:

$$G = \frac{((0.5 + 2) R_{ii} - R_i) \cos \theta}{(1 - \cos \theta)}$$

Tabla de parámetros (m):

Generación	Número de ramas	Diámetro (d_n)	Longitud (L_n)	Área conducto (A_n)	Área total (A)	Radio de la bifurcación (G)
0	1	1,80E-02	1,20E-01	2,54E-04	2,54E-04	2,837409E-02
1	2	1,22E-02	4,78E-02	1,17E-04	2,34E-04	1,924933E-02
2	4	8,28E-03	2,49E-02	5,39E-05	2,16E-04	1,305898E-02
3	8	5,62E-03	1,69E-02	2,48E-05	1,98E-04	1,247415E-02
4	16	4,45E-03	1,27E-02	1,56E-05	2,49E-04	9,808751E-03
5	32	3,51E-03	1,07E-02	9,69E-06	3,10E-04	7,938157E-03
6	64	2,81E-03	9,01E-03	6,19E-06	3,96E-04	6,502942E-03
7	128	2,27E-03	7,61E-03	4,05E-06	5,19E-04	5,392489E-03
8	256	1,86E-03	6,42E-03	2,72E-06	6,96E-04	4,526500E-03
9	512	1,54E-03	5,41E-03	1,87E-06	9,58E-04	3,846220E-03
10	1024	1,30E-03	4,57E-03	1,32E-06	1,35E-03	3,308327E-03
11	2048	1,10E-03	3,85E-03	9,56E-07	1,96E-03	2,880642E-03
12	4096	9,50E-04	3,25E-03	7,09E-07	2,90E-03	2,539104E-03
13	8192	8,28E-04	2,74E-03	5,39E-07	4,42E-03	2,265614E-03
14	16384	7,32E-04	2,31E-03	4,20E-07	6,89E-03	2,046486E-03
15	32768	6,54E-04	1,95E-03	3,36E-07	1,10E-02	1,871340E-03
16	65536	5,92E-04	1,65E-03	2,75E-07	1,80E-02	1,732290E-03

I. UDF

ANEXO II. UDF.

Algoritmo (User Defined Function) usado en la modelo numérico para simular las condiciones de contorno descritas anteriormente.

```
#include "udf.h"
#if !PARALLEL
    #define node_serial myid
    #define node_host 999999
    #define node_zero 0
    #define node_one 1
    #define compute_node_count 1
    #define PRF_CRECV_INT(a,b,c,d)
    #define PRF_CSEND_INT(a,b,c,d)
    #define PRF_CRECV_REAL(a,b,c,d)
    #define PRF_CSEND_REAL(a,b,c,d)
#endif
#define NUM_C 104
#define ID_BC
293,292,291,290,289,288,287,286,285,284,283,282,281,187,186,185,184,183,182,181,180,179,
178,177,176,175,505,504,503,502,501,500,499,498,497,496,49
5,494,493,399,398,397,396,395,394,393,392,391,390,389,388,387,901,900,899,898,897,896,89
5,894,893,892,891,890,889,821,820,819,818,817,816,815,814,
813,812,811,810,809,715,714,713,712,711,710,709,708,707,706,705,704,703,610,609,608,607,
606,605,604,603,602,601,600,599,598
#define ID_IN
280,279,278,277,276,275,274,273,272,271,270,269,268,174,173,172,171,170,169,168,167,166,
165,164,163,162,492,491,490,489,488,487,486,485,484,483,48
2,481,480,386,385,384,383,382,381,380,379,378,377,376,375,374,888,887,886,885,884,883,88
2,881,880,879,878,877,876,808,807,806,805,804,803,802,801,
800,799,798,797,796,702,701,700,699,698,697,696,695,694,693,692,691,690,597,596,595,594,
593,592,591,590,589,588,587,586,585
#define DENS 1.225
#define MAX_F 400
#define MAX_NDS 8
#define RELAJ 1
int nc = NUM_C;
int bcID[NUM_C] = {ID_BC};
int inID[NUM_C] = {ID_IN};
int inS[NUM_C];
int rel[NUM_C][MAX_NDS][MAX_F];
real vu_mirror[NUM_C][ND_ND];
real in_mflow[NUM_C][MAX_F];
real in_vel[NUM_C][MAX_F][ND_ND];
DEFINE_EXECUTE_ON_LOADING(Load_copyVel, libname)
{
    face_t f;
    Thread *t;
    Domain *dom;
    real inCoor[MAX_F][ND_ND], inSup[MAX_F][ND_ND];
    real inCentro[ND_ND], bcCentro[ND_ND];
    real inVector[ND_ND], bcVector[ND_ND];
    int innf;
    real coor[MAX_NDS][MAX_F][ND_ND], sup[ND_ND];
    real centr[MAX_NDS][ND_ND], vect[MAX_NDS][ND_ND];
```

```

int nod, nf[MAX_NDS];
real tprod1, tprod2, tresta[ND_ND], dis;
int i, j, n, c, ia;
if (myid == node_host) return;
Message0("\nEXECUTE_ON_LOADING\nRelaciones entre caras...\n");
dom = Get_Domain(1);
nod = (myid == node_serial ? 0 : myid);
for (c=0;c<NUM_C;c++) for (n=0;n<MAX_NDS;n++) for (i=0;i<MAX_F;i++) rel[c][n][i] = -1;
for (c=0;c<nc;c++)
{
    t = Lookup_Thread(dom, inID[c]);
    NV_S (centr[nod], =, 0);
    NV_S (vect[nod], =, 0);
    i = 0;
    begin_f_loop(f,t)
    {
        if PRINCIPAL_FACE_P(f,t)
        {
            F_AREA(sup,f,t);
            NV_V(vect[nod], +=, sup);
            F_CENTROID(coor[nod][i],f,t);
            NV_VS(centr[nod], +=, coor[nod][i], *, NV_MAG(sup));
            i++;
        }
    }
    end_f_loop(f,t)
    nf[nod] = i;
    if (myid == node_serial || myid == node_zero)
    {
        NV_V (inVector, =, vect[nod]);
        NV_V (inCentro, =, centr[nod]);
        for (i=0;i<nf[nod];i++) NV_V (inCoor[i], =, coor[nod][i]);
        innf = nf[nod];
    }
    else
    {
        PRF_CSEND_INT(node_zero, &nf[nod], 1, myid);
        PRF_CSEND_REAL(node_zero, vect[nod], ND_ND, myid);
        PRF_CSEND_REAL(node_zero, centr[nod], ND_ND, myid);
        PRF_CSEND_REAL(node_zero, coor[nod][0], MAX_F*ND_ND, myid);
    }
    if (myid == node_zero)
    {
        for (n=node_one;n<compute_node_count;n++)
        {
            PRF_CRECV_INT(n, &nf[n], 1, n);
            PRF_CRECV_REAL(n, vect[n], ND_ND, n);
            PRF_CRECV_REAL(n, centr[n], ND_ND, n);
            PRF_CRECV_REAL(n, coor[n][0], MAX_F*ND_ND, n);
            NV_V (inVector, +=, vect[n]);
            NV_V (inCentro, +=, centr[n]);
            for (i=0;i<nf[n];i++) NV_V (inCoor[i+innf], =, coor[n][i]);
            innf += nf[n];
        }
    }
    t = Lookup_Thread(dom, bcID[c]);
    NV_S (centr[nod], =, 0);
    NV_S (vect[nod], =, 0);

```

```

i = 0;
begin_f_loop(f,t)
{
    if PRINCIPAL_FACE_P(f,t)
    {
        F_AREA(sup,f,t);
        NV_V(vect[nod], +=, sup);
        F_CENTROID(coor[nod][i],f,t);
        NV_VS(centr[nod], +=, coor[nod][i], *, NV_MAG(sup));
        i++;
    }
}
end_f_loop(f,t)
nf[nod] = i;
if (myid == node_serial || myid == node_zero)
{
    NV_V (bcVector, =, vect[nod]);
    NV_V (bcCentro, =, centr[nod]);
}
else
{
    PRF_CSEND_INT(node_zero, &nf[nod], 1, myid);
    PRF_CSEND_REAL(node_zero, vect[nod], ND_ND, myid);
    PRF_CSEND_REAL(node_zero, centr[nod], ND_ND, myid);
    PRF_CSEND_REAL(node_zero, coor[nod][0], MAX_F*ND_ND, myid);
}
if (myid == node_zero)
{
    for (n=node_one;n<compute_node_count;n++)
    {
        PRF_CRECV_INT(n, &nf[n], 1, n);
        PRF_CRECV_REAL(n, vect[n], ND_ND, n);
        PRF_CRECV_REAL(n, centr[n], ND_ND, n);
        PRF_CRECV_REAL(n, coor[n][0], MAX_F*ND_ND, n);
        NV_V (bcVector, +=, vect[n]);
        NV_V (bcCentro, +=, centr[n]);
    }
}
if (myid == node_serial || myid == node_zero)
{
    dis = NV_MAG(inVector);
    NV_S(inCentro, /=, dis);
    NV_S(inVector, /=, dis);
    dis = NV_MAG(bcVector);
    NV_S(bcCentro, /=, dis);
    NV_S(bcVector, /=, dis);
    NV_VV(tresta, =, bcCentro, -, inCentro);
    tprod1 = NV_DOT(tresta,bcVector);
    tprod2 = NV_DOT(tresta,inVector);
    inS[c] = ((tprod1 * tprod2) < 0 ? 1 : -1);
    NV_VS_VS(vu_mirror[c], =, inVector, *, inS[c], -, bcVector, *, 1);
    dis = NV_MAG(vu_mirror[c]);
    NV_S(vu_mirror[c], /=, dis);
    for (i=0; i<innf; i++)
    {
        NV_V(inCoor[i], -=, inCentro);
        dis = 2*NV_DOT(vu_mirror[c], inCoor[i]);
        NV_V_VS(inCoor[i], +=, bcCentro, -, vu_mirror[c], *, dis);
    }
}

```

```

        for(n=0; n<compute_node_count;n++)
        {
            for (i=0;i<nf[n];i++)
            {
                ia = 0;
                NV_VV(tresta, =, coor[n][i], -, inCoor[0]);
                dis = NV_MAG2(tresta);
                for (j=1; j<innf; j++)
                {
                    NV_VV(tresta, =, coor[n][i], -, inCoor[j]);
                    if (NV_MAG2(tresta) < dis)
                    {
                        ia = j;
                        dis = NV_MAG2(tresta);
                    }
                }
                rel[c][n][i] = ia;
            }
        }
    }
}
if (myid == node_zero)
    for (n=node_one;n<compute_node_count;n++)
    {
        PRF_CSEND_INT(n, rel[0][0], NUM_C*MAX_NDS*MAX_F, myid);
        PRF_CSEND_INT(n, inS, NUM_C, myid);
        PRF_CSEND_REAL(n, vu_mirror[0], NUM_C*ND_ND, myid);
    }
else if (myid != node_serial)
{
    PRF_CRECV_INT(node_zero, rel[0][0], NUM_C*MAX_NDS*MAX_F, node_zero);
    PRF_CRECV_INT(node_zero, inS, NUM_C, node_zero);
    PRF_CRECV_REAL(node_zero, vu_mirror[0], NUM_C*ND_ND, node_zero);
}
for (c=0;c<NUM_C;c++)
    for (i=0;i<MAX_F;i++)
    {
        in_mflow[c][i] = 0;
        for (n=0;n<MAX_NDS;n++)
            in_vel[c][i][n] = 0;
    }
    Message0("Hecho\n\n");
}
DEFINE_INIT(Init_copyVel,d)
{
    int c, i, n;
    Message0("\nINIT\nInicializacion de las matrices de flujo y velocidad en las facas de las
    intasoc...\n");
    for (c=0;c<NUM_C;c++)
        for (i=0;i<MAX_F;i++)
        {
            in_mflow[c][i] = 0;
            for (n=0;n<MAX_NDS;n++)
                in_vel[c][i][n] = 0;
        }
    Message0("Hecho\n\n");
}
DEFINE_EXECUTE_AT_END(Iter_copyVel)
{

```



```

face_t f;
Thread *t;
Domain *dom;
cell_t c0, c1 = -1;
Thread *t0, *t1 = NULL;
real tvel0, tvel1;
real mflow[MAX_NDS][MAX_F], vel[MAX_NDS][MAX_F][ND_ND];
int nod, innf, nf[MAX_NDS];
int i, j, n, c;
if (myid == node_host) return;
dom = Get_Domain(1);
nod = (myid == node_serial ? 0 : myid);
for (c=0;c<nc;c++)
{
    t = Lookup_Thread(dom, inID[c]);
    innf = 0;
    i = 0;
    begin_f_loop(f,t)
    {
        if PRINCIPAL_FACE_P(f,t)
        {
            mflow[nod][i] = F_FLUX(f,t);
            c0 = F_C0(f,t);
            t0 = F_C0_THREAD(f,t);
            c1 = F_C1(f,t);
            t1 = F_C1_THREAD(f,t);
            tvel0 = C_U(c0,t0);
            tvel1 = C_U(c1,t1);
            vel[nod][i][0] = (tvel0 + tvel1) / 2;
            tvel0 = C_V(c0,t0);
            tvel1 = C_V(c1,t1);
            vel[nod][i][1] = (tvel0 + tvel1) / 2;
            if (ND_ND == 3)
            {
                tvel0 = C_W(c0,t0);
                tvel1 = C_W(c1,t1);
                vel[nod][i][2] = (tvel0 + tvel1) / 2;
            }
            i++;
        }
    }
    end_f_loop(f,t)
    nf[nod] = i;
    if (myid == node_serial || myid == node_zero)
        for (i=0;i<nf[nod];i++)
        {
            in_mflow[c][i] = mflow[nod][i];
            for (j=0;j<ND_ND;j++) in_vel[c][i][j] = vel[nod][i][j];
        }
    innf = nf[nod];
}
else
{
    PRF_CSEND_INT(node_zero, &nf[nod], 1, myid);
    PRF_CSEND_REAL(node_zero, mflow[nod], MAX_F, myid);
    PRF_CSEND_REAL(node_zero, vel[nod][0], MAX_F*ND_ND, myid);
}
if (myid == node_zero)
{

```

```

        for (n=node_one;n<compute_node_count;n++)
        {
            PRF_CRECV_INT(n, &nf[n], 1, n);
            PRF_CRECV_REAL(n, mflow[n], MAX_F, n);
            PRF_CRECV_REAL(n, vel[n][0], MAX_F*ND_ND, n);
            for (i=0;i<nf[n];i++)
            {
                in_mflow[c][i+innf] = mflow[n][i];
                for (j=0;j<ND_ND;j++) in_vel[c][i+innf][j] = vel[n][i][j];
            }
            innf += nf[n];
        }
    }
}
if (myid == node_zero)
    for (n=node_one;n<compute_node_count;n++)
    {
        PRF_CSEND_REAL(n, in_mflow[0], NUM_C*MAX_F, myid);
        PRF_CSEND_REAL(n, in_vel[0][0], NUM_C*MAX_F*ND_ND, myid);
    }
else if (myid != node_serial)
{
    PRF_CRECV_REAL(node_zero, in_mflow[0], NUM_C*MAX_F, node_zero);
    PRF_CRECV_REAL(node_zero, in_vel[0][0], NUM_C*MAX_F*ND_ND, node_zero);
}
}
DEFINE_PROFILE(copyVel_Mag_NtB,tbc,ind)
{
    face_t fbc;
    real sup[ND_ND];
    real bcmflow, inmflow, newmflow;
    int thID, ibc, nod;
    int i, n;
    if (! Data_Valid_P()) return;
    thID = THREAD_ID(tbc);
    ibc = 0;
    while ((bcID[ibc] != thID) && (ibc < nc)) ibc++;
    if (ibc == nc)
    {
        Message0("\n\n***** error *****");
        Message0("\nID de condicion de contorno incorrecto");
        Message0("\nProfile asignado a ID: %d, que no esta en la lista", thID);
        return;
    }
    nod = (myid == node_serial ? 0 : myid);
    i = 0;
    begin_f_loop(fbc,tbc)
    {
        if PRINCIPAL_FACE_P(fbc,tbc)
        {
            F_AREA(sup,fbc,tbc);
            bcmflow = F_FLUX(fbc,tbc);
            inmflow = inS[ibc] * in_mflow[ibc][rel[ibc][nod][i]];
            newmflow = bcmflow + 0.5 * RELAJ * (inmflow - bcmflow);
            F_PROFILE(fbc,tbc,ind) = - newmflow / NV_MAG(sup) / DENS;
            i++;
        }
    }
    end_f_loop(fbc,tbc)
}

```

```

}
DEFINE_PROFILE(copyVel_X,tbc,ind)
{
    face_t fbc;
    real bcvelx, tinvelx;
    real invel[ND_ND], vumirror[ND_ND];
    real proy;
    int thID, ibc, nod;
    int i, j;
    if (! Data_Valid_P()) return;
    thID = THREAD_ID(tbc);
    ibc = 0;
    while ((bcID[ibc] != thID) && (ibc < nc)) ibc++;
    if (ibc == nc)
    {
        Message0("\n\n***** error *****");
        Message0("\nID de condicion de contorno incorrecto");
        Message0("\nProfile asignado a ID: %d, que no esta en la lista", thID);
        return;
    }
    nod = (myid == node_serial ? 0 : myid);
    i = 0;
    begin_f_loop(fbc,tbc)
    {
        if PRINCIPAL_FACE_P(fbc,tbc)
        {
            bcvelx = F_U(fbc,tbc);
            for (j=0;j<ND_ND;j++)
            {
                invel[j] = in_vel[ibc][rel[ibc][nod][i]][j];
                vumirror[j] = vu_mirror[ibc][j];
            }
            proy = NV_DOT(vumirror, invel);
            tinvelx = invel[0] - 2 * proy * vumirror[0];
            F_PROFILE(fbc,tbc,ind) = bcvelx + 0.5 * RELAJ * (tinvelx - bcvelx);
            i++;
        }
    }
    end_f_loop(fbc,tbc)
}
DEFINE_PROFILE(copyVel_Y,tbc,ind)
{
    face_t fbc;
    real bcvely, tinvely;
    real invel[ND_ND], vumirror[ND_ND];
    real proy;
    int thID, ibc, nod;
    int i, j;
    if (! Data_Valid_P()) return;
    thID = THREAD_ID(tbc);
    ibc = 0;
    while ((bcID[ibc] != thID) && (ibc < nc)) ibc++;
    if (ibc == nc)
    {
        Message0("\n\n***** error *****");
        Message0("\nID de condicion de contorno incorrecto");
        Message0("\nProfile asignado a ID: %d, que no esta en la lista", thID);
        return;
    }
}

```

```

nod = (myid == node_serial ? 0 : myid);
i = 0;
begin_f_loop(fbc,tbc)
{
    if PRINCIPAL_FACE_P(fbc,tbc)
    {
        bcvely = F_V(fbc,tbc);
        for (j=0;j<ND_ND;j++)
        {
            invel[j] = in_vel[ibc][rel[ibc][nod][i]][j];
            vumirror[j] = vu_mirror[ibc][j];
        }
        proy = NV_DOT(vumirror, invel);
        tinvely = invel[1] - 2 * proy * vumirror[1];
        F_PROFILE(fbc,tbc,ind) = bcvely + 0.5 * RELAJ * (tinvely - bcvely);
        i++;
    }
}
end_f_loop(fbc,tbc)
}
DEFINE_PROFILE(copyVel_Z,tbc,ind)
{
    face_t fbc;
    real bcvelz, tinvelz;
    real invel[ND_ND], vumirror[ND_ND];
    real proy;
    int thID, ibc, nod;
    int i, j;
    if (!Data_Valid_P()) return;
    thID = THREAD_ID(tbc);
    ibc = 0;
    while ((bclID[ibc] != thID) && (ibc < nc)) ibc++;
    if (ibc == nc)
    {
        Message0("\n\n***** error *****");
        Message0("\nID de condicion de contorno incorrecto");
        Message0("\nProfile asignado a ID: %d, que no esta en la lista", thID); return;
    }
    nod = (myid == node_serial ? 0 : myid);
    i = 0;
    begin_f_loop(fbc,tbc)
    {
        if PRINCIPAL_FACE_P(fbc,tbc)
        {
            bcvelz = F_W(fbc,tbc);
            for (j=0;j<ND_ND;j++)
            {
                invel[j] = in_vel[ibc][rel[ibc][nod][i]][j];
                vumirror[j] = vu_mirror[ibc][j];
            }
            proy = NV_DOT(vumirror, invel);
            tinvelz = invel[2] - 2 * proy * vumirror[2];
            F_PROFILE(fbc,tbc,ind) = bcvelz + 0.5 * RELAJ * (tinvelz - bcvelz);
            i++;
        }
    }
    end_f_loop(fbc,tbc)
}

```

I. ARTÍCULOS PUBLICADOS

ANEXO III. ARTÍCULOS PUBLICADOS

Se presentan los artículos relacionados con la presente tesis y a continuación se muestran algunos de ellos.

Publicaciones en revistas.

- ❖ Ana F. Tena, Pere Casan, Alfonso Marcos, Raúl Barrio, Jorge Parrondo. A methodology for geometry generation of the lower conductive zone of the lung airways and simulation by intermediate boundary conditions. Proceedings of Fluids Engineering Summer Meeting, FEDSM2012-72419, pp. 847-854; 8 pages DOI:10.1115/FEDSM2012- 72419
- ❖ A. F. Tena, P. Casan, J. Fernández, C. Ferrera, A. Marcos. Characterization of particle deposition in a lung model using an individual path. EPJ Web of Conferences, 45 01079 (2013), DOI:10.1051/epjconf/34501079.
- ❖ Ana Fernández Tena, A. Marcos, A. I. Enríquez, R. Guzmán, H. Jiménez, L. Vigil, P. Casan. Modelo tridimensional de la vía aérea para la simulación del depósito de partículas inhaladas. Archivos de Bronconeumología, Junio 2012, Núm. Esp. Congreso - Vol. 48 (1 - 296). Impact Factor 1,372

Publicaciones en congresos internacionales.

- ❖ Título: Fluid dynamic analysis of the deposition particles in the first branches of the lung airways using a three dimensional CFD model
Autores: Ana F. Tena, Pere Casan, Alfonso Marcos, Raúl Barrio, Eduardo Blanco Congreso: 4th International Congress on Energy and Environment Engineering and Management
Lugar: Mérida, Badajoz
Año: 2011

- ❖ Título: Analysis of the fluid dynamic characteristics of the obstructive pulmonary diseases using a three-dimensional CFD model of the upper conductive zone of the lung airways
Autores: Ana F. Tena, Pere Casan, Alfonso Marcos, Raúl Barrio, Eduardo Blanco
Congreso: ECCOMAS Thematic International Conference on Simulation and Modeling of Biological Flows (SIMBIO 2011)
Lugar: Bruselas, Bélgica
Año: 2011
- ❖ Título: Nueva metodología para la generación de la geometría de la zona conductiva inferior de las vías respiratorias del pulmón
Autores: Alfonso Carlos Marcos, Alberto Marcos, Ana F. Tena, Pere Casan, Raúl Barrio
Congreso: XVI Congreso Internacional de Ingeniería de Proyectos
Lugar: Valencia
Año: 2012
- ❖ Título: Numerical simulation of the nanoparticle deposition using a three-dimensional model of lung airways
Autores: Ana F. Tena, Pere Casan, Joaquín Fernández, Alfonso Marcos, Raúl Barrio
Congreso: The 15th International Conference on Fluid Flow Technologies (CMFF'12)
Lugar: Budapest, Hungría
Año: 2012

Publicaciones en congresos nacionales.

- ❖ Título: Modelo tridimensional de la vía aérea para la simulación del depósito de partículas inhaladas
Autores: Ana Fernández Tena, A. Marcos, A. I. Enríquez, R. Guzmán, H. Jiménez, L. Vigil, P. Casan
Congreso: 45 congreso SEPAR.
Lugar: Madrid
Año: 2012

DRAFT

Proceedings of the ASME 2012 Fluids Engineering Summer Meeting
 FEDSM2012
 July 8-12, 2012, Rio Grande, Puerto Rico

FEDSM2012-72419

A METHODOLOGY FOR GEOMETRY GENERATION OF THE LOWER CONDUCTIVE ZONE OF THE LUNG AIRWAYS AND SIMULATION BY INTERMEDIATE BOUNDARY CONDITIONS

Ana F Tena

Instituto Nacional de Silicosis
 Oviedo, Asturias, Spain

Pere Casan

Instituto Nacional de Silicosis
 Oviedo, Asturias, Spain

Raúl Barrio

Universidad de Oviedo
 Gijón, Asturias, Spain

Alfonso Marcos

Universidad de Extremadura
 Badajoz, Extremadura, Spain

Eduardo Blanco

Universidad de Oviedo
 Gijón, Asturias, Spain

ABSTRACT

This paper presents a general methodology for the development and simulation of a human lung between scales 0-16. The methodology is based on the simulation of only one of the two possible branches in each bronchiole. The operation of the branches that are truncated is included by means of a User-Defined Function that imposes the velocity profile calculated for the active branches in the truncated ones in order to make the hydraulic losses equal between the branches. The procedure was tested up to the 7th generation by imposing the time profile of a real forced spirometry test as boundary condition in the trachea. The test showed a very good agreement between the numerical predictions and the spirometry data.

INTRODUCTION

The morphology of the human lung consists of a series of dichotomous bifurcations that result in a complex branching network [1, 2]. Several idealized descriptions of this morphology have been proposed in the technical literature in order to generate relative simple geometries than can be used to resolve the flow with a proper CFD code.

However, the simulation of the entire lung excluding the alveolar region (generations 0-16) is still beyond the actual computational capacities, so that typical calculations are carried out by means of: 1) simulations up to a specific generation only [3-5], sometimes with 1D transmission models of the small-scale airways [6]; 2) sequential simulation of subsections [6-8]

that, unfortunately, do not allow simultaneous coupling of the flow at all scales; and 3) the resolution of a reduced number of flow paths with proper boundary conditions or stochastic approaches [9, 10]. Furthermore, these simulations usually employ constant pressure or constant mass flow boundary conditions that have been found to produce reasonable results only during inspiration, since the flow in the expiration cycle is substantially more complex.

This article exposes a general methodology to create and simulate a geometrical model of the human lung from the trachea to the alveolar region (generations 0-16). The methodology, based on the morphologies proposed by Weibel [11] and Kitaoka [12], pays special attention to the division in each bronchiole. The main objective of the investigation is to develop a simplified morphology of the lung that can allow resolving the flow at all scales simultaneously while avoiding prohibitive mesh sizes and computational times. We take advantage of the symmetry of the model in each bronchiole with the purpose of calculating the flow only along one of the two possible branches in the bifurcation. The velocity profile at the branch simulated is imposed to the truncated branch as boundary condition by means of an external User-Defined Function (UDF).

This procedure was found to be valid for both the inspiration and the expiration cycle and avoids imposing a constant mass flow that results in a non-realistic constant velocity profile. The numerical solver used in the present work

is the commercial code Fluent® [13]. This code is run to resolve the Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations (URANS) together with the RNG k -epsilon model for turbulent closure.

NOMENCLATURE

A	area, m^2
d	branch diameter, m
L, l	length, length of the branch, m
n	order of the branch, (0 to 16)
p	static pressure, Pa
Q	volume flow rate, l/s
t	time, s
v	velocity, m/s
β	angle, °

NUMERICAL MODEL OF THE LUNG

The morphology of a typical lung was developed with the commercial code Gambit® [14]. The geometry generated is based on the models proposed by Weibel [11] and Kitaoka [12], comprising the generations 0 to 16 thus excluding the upper conductive zone to the trachea and the alveolar region.

The geometry and bifurcations in all the bronchioles are generated by a similar procedure. First of all, three circles are drawn corresponding to: the diameter of the high-order generation, the diameter of the low-order generation, and an intermediate diameter between them see (Fig. 1). Additional secondary surfaces are created in the plane containing the circles and in the perpendicular plane.

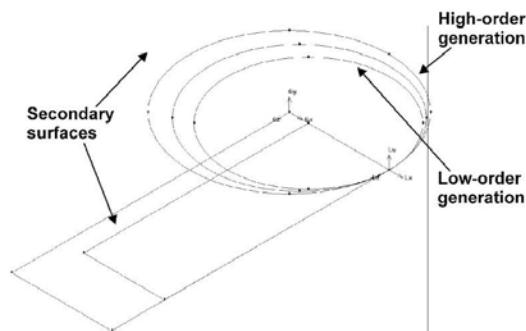


Fig. 1 Diameters in the bifurcation.

As seen, all the circles are split in 4 arches in order to create the front, back, and lateral boundaries of the volume, as explained later. The major edge of one of the secondary surfaces is extruded a specific length L to generate an axis of rotation (Fig. 2). The path from the high-order to the low-order generation in the bronchiole is prescribed by rotating the intermediate and the smaller circle round this axis an angle of $\beta/2$ and β respectively. The remaining secondary surfaces are rotated an angle of β round the axis too. The parameters L and

β were set to 0.1 m and 35° respectively based on the guidelines given in [11, 12].

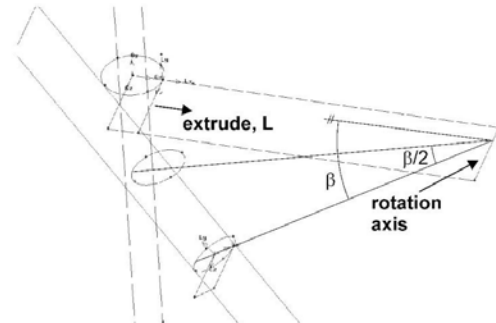


Fig. 2 Path in the bronchiole from the high-order to the low-order generation.

It is possible to generate the lateral surfaces of the bronchiole at this stage by means of the circles' arches and symmetry imposition. The right-hand lateral surface is created by joining the top and bottom arches with two additional curves generated by 3-point arc (see Fig. 3). This lateral surface, together with the bottom circle, is reflected with respect to the secondary vertical plane (plane of symmetry) in order to create the left-hand lateral surface, as shown in Fig. 3. Besides, the secondary surface that lies in the plane of the bottom circle is extruded until intersecting the plane of symmetry. The intersection originates an additional axis of rotation that will be used to create the bottom surface of the bronchiole.

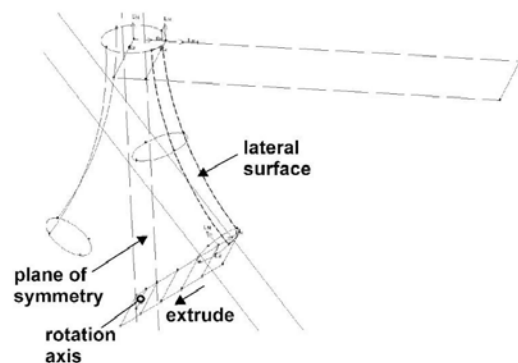


Fig.3 Generation of the lateral surfaces in the bronchiole.

The inner arch of the bottom circle is revolved with respect to the axis indicated in the previous paragraph until joining with its symmetrical pal (Fig. 4). All the necessary surfaces are now available so that the volume of the bronchiole can be yet generated. The result of these operations is seen in Fig. 4.

As explained in the introduction, the main purpose of the investigation is to develop a numerical model of the lung as realistic as possible while avoiding prohibitive computational costs. To achieve this, only the morphology of the lung along one of the two possible branches in each bronchiole will be developed. This means that one branch will be considered as 'truncated' in the sense that the remaining geometry of the lung won't be developed from that point.

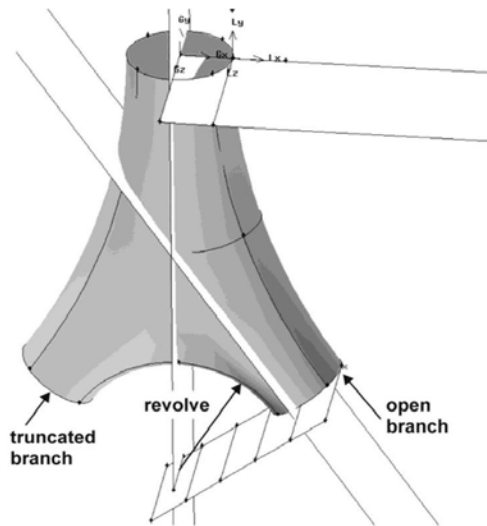


Fig. 4 Geometry of the bifurcation.

The last step in the creation of the bronchiole's morphology is to generate the geometry of the active (open) branch. This is done by extruding the circle that prescribes the diameter of the low-order generation a specific length l (Fig. 5). The secondary surface that lies in the plane on this circle is moved subsequently to the plane located at the end of the extrusion. This surface, together with the secondary surface containing the axis of the cylinder generated in the extrusion, is rotated 90° with respect to the local axis indicated in the figure, according to the models described in [11, 12].

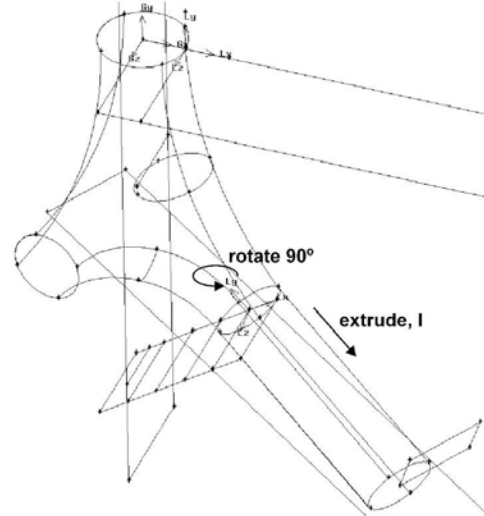


Fig. 5 Generation of the open branch.

There is now a situation that is equivalent to that of Fig. 1; if the procedure described so far is repeated systematically, the geometry of the lung can be developed up to reaching the alveolar region (generation 16). The numerical morphology of the lung based on this procedure until the lowest generation is shown in Fig. 6; this figure also presents a detail of the lower generations. A series of additional surfaces were generated in the branches for the purpose of data analysis.

The complete morphology of the lung can be generated from the numerical model of Fig. 6. This is done by imposing symmetry in each of the truncated branches. The entire lung is presented in Fig. 7 for showing purposes only; of course, the numerical simulation of this complete morphology would be simply unavoidable.

A summary of the main geometric dimensions in the branches is presented in Table 1. The diameter d and the length l were deduced from the relations proposed by Weibel and Kitaoka [11, 12]:

$$\begin{cases} d = 0.018 \exp(-0.388 n) & \text{if } n \leq 3 \\ d = 0.013 \exp[-(0.2929 - 0.00624 n) n] & \text{if } n > 3 \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} l = 0.12 \exp(-0.92 n) & \text{if } n \leq 3 \\ l = 0.025 \exp(-0.17 n) & \text{if } n > 3 \end{cases} \quad (2)$$

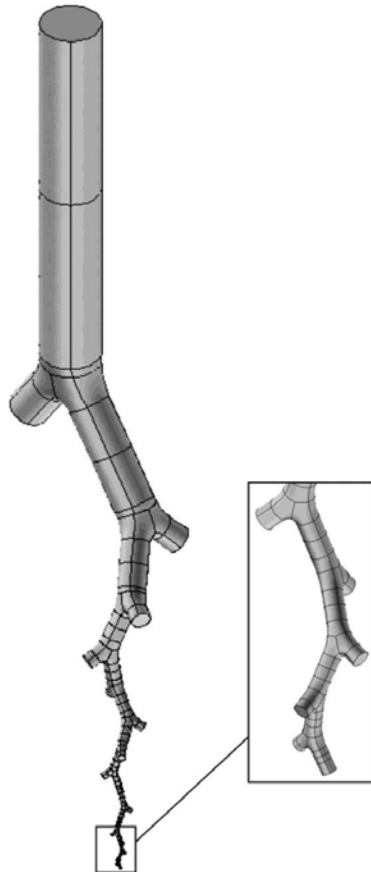


Fig. 6 Numerical model of the lung.

n	Branches	d (m)	l (m)	A (m ²)
0	1	0.01800	0.12000	2.545E-04
1	2	0.01221	0.04782	1.171E-04
2	4	0.00828	0.02485	5.390E-05
3	8	0.00562	0.01686	2.481E-05
4	16	0.00445	0.01267	1.556E-05
5	32	0.00351	0.01069	9.692E-06
6	64	0.00281	0.00901	6.189E-06
7	128	0.00227	0.00761	4.052E-06
8	256	0.00186	0.00642	2.720E-06
9	512	0.00154	0.00541	1.872E-06
10	1024	0.00130	0.00457	1.321E-06
11	2048	0.00110	0.00385	9.556E-07
12	4096	0.00095	0.00325	7.088E-07
13	8192	0.00083	0.00274	5.391E-07
14	16384	0.00073	0.00231	4.203E-07
15	32768	0.00065	0.00195	3.360E-07
16	65536	0.00059	0.00165	2.754E-07
17	131072	0.00054	0.00139	2.314E-07

Table 1 Main parameters of the branches.

The numerical model of the lung was meshed with tetrahedral cells due to their better adaptation to complex geometries. The size of the tetrahedrons diminishes while descending from the high-order to the low-order generations. A boundary layer mesh was built before meshing the volumes in order to obtain a better description of the boundary layer in the numerical calculations. The size of the tetrahedrons in the series of volumes created in the model is imposed to be consistent with the size of the boundary layer cells. The total size of the grid is about 10^6 cells. A quality analysis of the mesh showed a very satisfactory result, indicating a magnitude of the equisize skew that was below 0.6 for 98% of the cells in the mesh.

Figure 8 shows an example of the surface mesh in some branches. Besides, a detail of the boundary layer mesh in one truncated branch is presented; in this case, only the cells within the volume corresponding to this boundary layer mesh are made visible in the figure.



Fig. 7 Complete morphology of the lung.

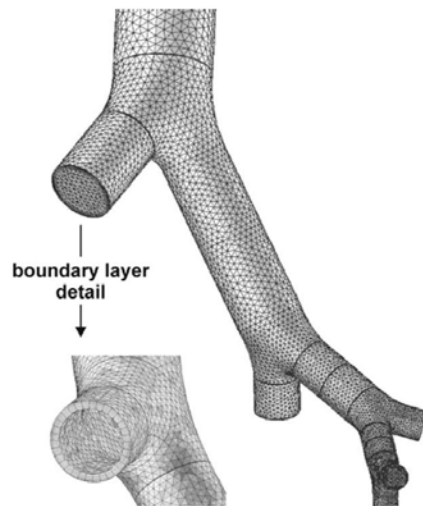


Fig. 8 Example of the surface mesh in some branches. A detail of the boundary layer mesh in a truncated branch is also shown.

A grid dependence analysis was carried out before performing the final calculations. For this purpose, two additional grids of size $2 \cdot 10^6$ and $4 \cdot 10^6$ cells were built in order to check the change in the magnitude of two reference variables as a function of the number of cells. The reference variables chosen were the static pressure and the volume flow rate at the lowest generation. It was observed that the typical variations predicted were below 1.5% (when compared to the results for the finest grid) even for the coarse mesh.

CALCULATION METHODOLOGY

The numerical calculations were resolved with the commercial code Fluent® [13]. This code was used to solve the Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations (URANS) by the finite volume method.

The solver was set to pressure-based and implicit with an absolute formulation for the velocity fields. The discretization of the spatial and temporal derivatives in the equations was carried out by means of second-order schemes. A standard discretization for the pressure was established together with the SIMPLE algorithm to resolve the coupling between pressure and velocity fields. Turbulence closure was imposed with the RNG k -epsilon model and enhanced wall treatment to resolve the flow field close to the walls.

The boundary conditions imposed during the inspiration cycle were a specific volume flow rate at the trachea and a constant gauge pressure at the lowest generation. In contrast, a

specific volume flow rate at the bottom of the lung and a zero gauge pressure at the trachea were prescribed during expiration. An additional simulation of the expiration cycle was carried out by imposing the time profile of the static pressure obtained in inspiration as boundary condition at the lowest generation. This was done in order to check the consistency of the numerical predictions as explained in the following section.

Since the simulation performed was not steady but variable in time, a law of variation for the volume flow rate along time was prescribed. This law was obtained by means of a forced spirometry test of one of the authors and it is presented in Fig. 9. The temporal evolution of the volume flow rate was imposed at the inlet boundary during the unsteady calculations by means of an external User-Defined Function (UDF). As observed in Fig. 9, the rate of change of the volume flow rate is very dependent on the time interval considered. In consequence, the UDF included a subroutine to adapt the magnitude of the time step as a function of this rate of change (adaptive time step). To achieve this, the original spirometry function was split in a series of intervals (adjusted data in Fig. 9), each with a specific time step, with the purpose of reducing the computational time for the calculations. The number of time steps needed to simulate the entire breathing cycle was set finally to 37.

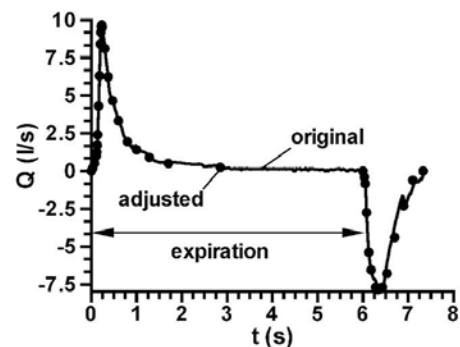


Fig. 9 Original and adjusted law for the forced spirometry test.

An additional User-Defined Function was used to impose an analogous operation of the two branches at each bronchiole (same hydraulic losses along each branch). This UDF obtains the velocity profile (either in inspiration or in expiration) from the Fluent® [13] calculations at the beginning of each open branch and imposes the same profile in the corresponding truncated branch. For this, the UDF stores a list of the open branches' identifiers and those of their mirror images. Of course, this methodology requires an iterative procedure in each time step until achieving convergence in the flow field calculated. Preliminary tests showed that a maximum of 100

iterations were required to assure convergence of the results in each time step. The convergence criterion established was to reduce the scaled residuals for all the variables below $8 \cdot 10^{-5}$. About 5 complete breathing cycles were required to achieve a periodic unsteady solution.

PRELIMINARY RESULTS

Although the numerical model of the lung was fully developed from generations 0 to 16, preliminary calculations including up to the 7th generation were performed first to check the validity of the procedure described in the previous section. The results presented in this section of the paper will correspond therefore to the model of the lung up to generation 7 only.

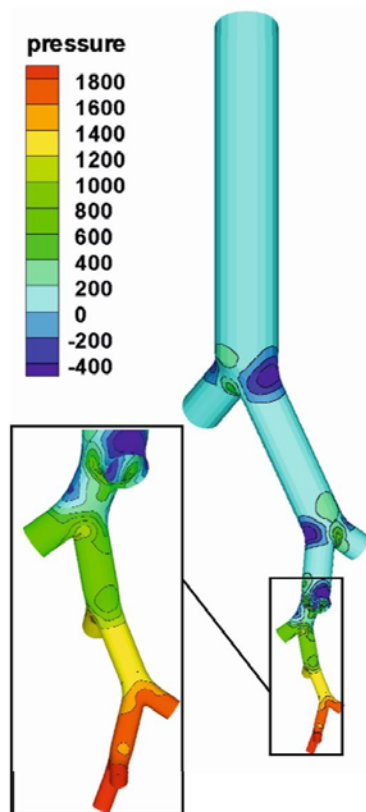


Fig. 10 Contours of the instantaneous static pressure [Pa] along the branches during expiration. A detail of the lower generations is also shown.

The contours of the instantaneous static pressure during expiration are shown in Fig. 10. As observed, the magnitude of the pressure diminishes while ascending from the lowest generation to the trachea, where a magnitude of zero pressure is reached (i.e. atmospheric conditions). It is also noted that regions of negative pressure are predicted at the bifurcations of the bronchioles for generations above the 4th one. The symmetry of the pressure field at the bifurcations of each bronchiole can be also appreciated in Fig. 10.

The instantaneous absolute velocity field during expiration is shown in Fig. 11 for generations between 2 and 7; also, a detail of this field at the lower generations is also presented. In general terms, it can be said that the flow is axisymmetric showing a predominant component of the velocity in the axial direction.

The time distribution of the instantaneous static pressure at the lowest generation (g7) during the entire breathing cycle is presented in Fig. 12. As explained in the previous section, this result was obtained by the imposition of the adjusted spirometry of Fig. 9 as inlet/outlet boundary condition at the trachea.

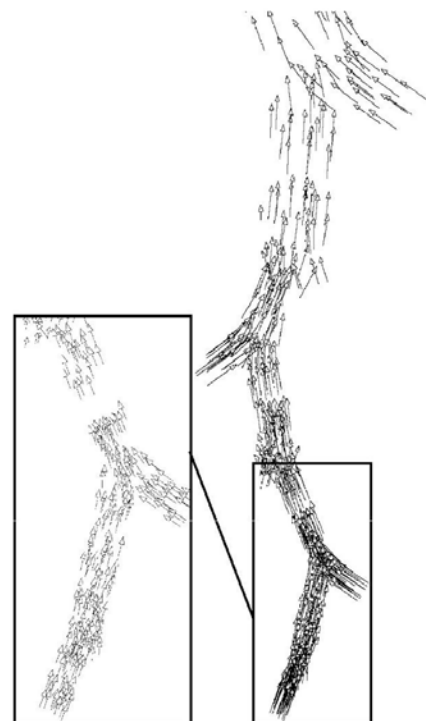


Fig. 11 Velocity vector field during expiration at generations 2-7 with a detail of the lower ones.

The results of Fig. 12 indicate an expected behavior, showing an increasing static pressure during the expiration cycle up to a maximum magnitude that corresponds to the maximum volumetric flow rate of Fig. 9. Similarly, it is observed that the static pressure during inspiration in generation 7 decreases to negative values and reaches a minimum magnitude at the same time where the inlet volumetric flow is maximum in absolute value.

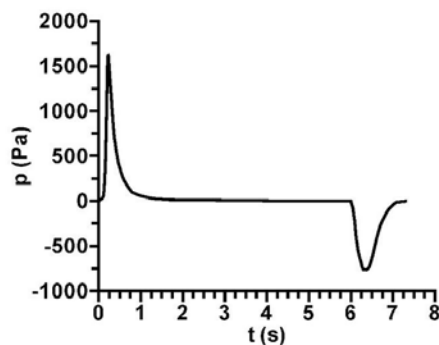


Fig. 12 Time distribution of the instantaneous static pressure at generation 7.

A last simulation was performed in order to check the consistency of the numerical predictions. For this purpose, the time profile of the static pressure obtained during expiration (see Fig. 12) was imposed at generation 7 as inlet boundary condition. If the calculation procedure is correct, the predicted time profile of the volume flow rate (or, similarly, of the outlet velocity) at the trachea should correspond to the original spirometry of Fig. 9.

The result of this test is presented in Fig. 13. As seen, the degree of agreement between the numerical calculation and the real spirometry is very satisfactory, showing almost an exact correspondence between both velocity profiles. This indicates that the numerical model developed and the UDF procedure described can be satisfactory used to simulate the operation of a lung.

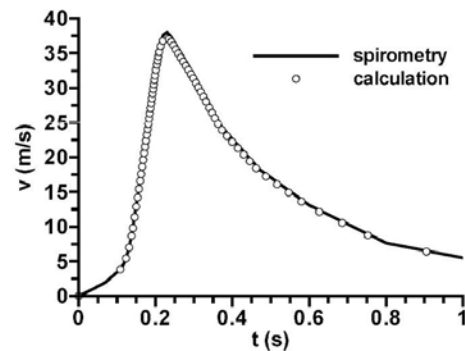


Fig. 13 Comparison between real spirometry and calculation (based on pressure boundary condition) during the expiration cycle.

CONCLUSIONS

This paper has exposed a general methodology to create and simulate a numerical model of a human lung. The main goal of the investigation was to develop a complete and realistic model of the lower conductive zone of the lung (generations 0 to 16) without the need of having a large number of cells that would dramatically increase the computational time.

For this purpose, only the path along one of the two possible airways in each bronchiole was generated and simulated. The operation of the 'truncated' airways was included in the simulations by means of a User-Defined Function. This function was used to: 1) obtain the velocity profile in each 'active' (open) branch, and 2) prescribe this profile in the corresponding truncated ones. This allowed imposing the same hydraulic losses at each airway and thus a symmetrical operation in each bronchiole.

Preliminary tests were carried out until generation 7 to check the validity of this procedure. The time profile of a real forced spirometry test was imposed in the trachea as boundary condition by means of an additional UDF, showing a satisfactory prediction of the general flow field in the lung. Also, the consistency of the numerical calculations was tested by imposing the time profile of the static pressure obtained at generation 7 during expiration as inlet boundary condition in that generation. It was observed that the outlet velocity profile predicted at the trachea corresponded almost exactly with that measured in the spirometry.

Once tested and validated, the numerical model described in the article will be used in the future to simulate the entire flow field in the lung (until generation 16) and also to study several pulmonary diseases (bronchitis, emphysema, etc.) and particle deposition by discrete phase modeling.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors gratefully acknowledge the financial support of Junta de Extremadura and FEDER under Project GR10047 and also of Ministerio de Ciencia e Innovación under Project DPI 2010-21103-C04-04.

REFERENCES

- [1] Sera, T., Fujioka, H., Yokota, H., Makinouchi, A., Himeno, R., Schroter, R. C., Tanishita, K., 2003, "Three-Dimensional Visualization and Morphometry of Small Airways From Microfocal X-Ray Computed Tomography". *Journal of Biomechanics*, **36**(11), pp. 1587-1594.
- [2] Burton, R. T., Isaacs, K. K., Fleming, J. S., Martonen, T. B., 2004, "Computer Reconstruction of a Human Lung Boundary Model From Magnetic Resonance Images". *Respiratory Care*, **49**(2), pp. 180-185.
- [3] Zhang, Z., Kleinstreuer, C., Kim, C., 2001, "Flow Structure and Particle Transport in a Triple Bifurcation Airway Model". *Journal of Fluids Engineering*, **123**(2), pp. 320-330.
- [4] Zhang, Z., Kleinstreuer, C., 2002, "Transient Airflow Structures and Particle Transport in a Sequentially Branching Lung Airway Model". *Physics of Fluids*, **14**(2), pp. 862-880.
- [5] Liu, Y., So, R. M. C., Zhang, C. H., 2002, "Modeling the Bifurcating Flow in a Human Lung Airway". *Journal of Biomechanics*, **35**(4), pp. 465-473.
- [6] Ma, B., Lutchey, K. R., 2006, "An Anatomically Based Hybrid Computational Model of the Human Lung and Its Application to Low Frequency Oscillatory Mechanics". *Annals of Biomedical Engineering*, **34**(11), pp. 1691-1704.
- [7] Nowak, N., Kadake, P. P., Annapragada, A. V., 2003, "Computational Fluid Dynamics Simulation of Airflow and Aerosol Deposition in Human Lungs". *Annals of Biomedical Engineering*, **31**(4), pp. 374-390.
- [8] Zhang, Z., Kleinstreuer, C., Kim, C. S., 2008, "Airflow and Nanoparticle Deposition in a 16-Generation Tracheobronchial Airway Model". *Annals of Biomedical Engineering*, **36**(12), pp. 2095-2110.
- [9] Gemci, T., Ponyavin, V., Chen, Y., Chen, H., Collins, R., 2008, "Computational Model of Airflow in Upper 17 Generations of Human Respiratory Tract". *Journal of Biomechanics*, **41**(9), pp. 2047-2054.
- [10] Walters, D. K., Luke, W. H., 2010, "A Method for Three-Dimensional Navier-Stokes Simulations of Large-Scale Regions of the Human Lung Airway". *Journal of Fluids Engineering*, **132**(5), 01-1 to 01-8.
- [11] Weibel, E. R. *Morphometry of the human lung*. Springer-Verlag, 1963.
- [12] Kitaoka, H., Takaki, R., Suki, B., 1999, "A Three Dimensional Model of the Human Airway Tree". *Journal of Applied Physiology*, **87**(6), pp. 2207-2217.
- [13] Fluent® version 6.3.26, 2006, ©ANSYS Inc. All Rights Reserved.
- [14] Gambit® version 2.4.6, 2006, ©ANSYS Inc. All Rights Reserved.

Characterization of particle deposition in a lung model using an individual path

A. F. Tena¹, P. Casan¹, J. Fernández^{2a}, C. Ferrera², A. Marcos²

¹Instituto Nacional de Silicosis. Dr Bellmunt s/n. 33006 Oviedo, Spain.

²Universidad de Extremadura. Avda de Elvas s/n, 06006 Badajoz, Spain.

Abstract. Suspended particles can cause a wide range of chronic respiratory illnesses such as asthma and chronic obstructive pulmonary diseases, as well as worsening heart conditions and other conditions. To know the particle depositions in realistic models of the human respiratory system is fundamental to prevent these diseases. The main objective of this work is to study the lung deposition of inhaled particles through a numerical model using UDF (User Defined Function) to impose the boundary conditions in the truncated airways. For each generation, this UDF puts the values of velocity profile of the flow path to symmetrical truncated outlet. The flow rates tested were 10, 30 and 60 ℓ/min , with a range of particles between 0.1 μm and 20 μm .

1 Introduction

One of main health problems to the urban population is the exposure to air pollution. Suspended particles (made up of soot, smoke, dust and liquid droplets) can cause a wide range of chronic respiratory illnesses such as asthma and chronic obstructive pulmonary diseases, as well as worsening heart conditions and other conditions. To know the particle depositions in realistic models of the human respiratory system is fundamental to prevent these diseases, and this is the objective of this work.

Following the model developed by Weibel [1], a 3D numerical model of the bronchial tree has been developed from the trachea to the sixteenth level bronchioles. It has been discretized with a mesh of about one million cells. The Navier-Stokes equations have been solved with a commercial CFD finite volume code (Ansys Fluent). Other authors [2 and 3] have developed similar models, also using an individual path. In order to obtain reasonable results from a truncated model, it is necessary to apply physiologically realistic boundary conditions at these truncated outlets.

This work is part of a broader, which tries to model the airflow in the lung with all their characteristics: unsteady flow, inhalation and exhalation of particles, common diseases (asthma, bronchitis, etc.). A first step was [4] the construction and simulation of a particular 7-level model, using a single way to study the unsteady flow that occurs during the execution of a spirometry test. A second step [5] was to study the lung deposition of inhaled particles through a numerical model. A third step,

the main objective of this work, is to study the lung deposition of inhaled particles through a numerical model by means of UDF (User Defined Function) to impose the boundary conditions in the truncated airways. For each generation, this UDF puts the values of the velocity profile of the flow path to symmetrical truncated outlet. The flow rates tested were 10, 30 and 60 ℓ/min , which are equivalent to the different respiratory rhythms. The particle size used ranged between 0.1 μm and 20 μm , being introduced by means of an injection type called surface, specifying particle properties and velocity.

2 Methodology

The numerical model of the nasal cavity and nasopharynx was obtained from a 30-year-old woman by means of CT images [6]. The throat reproduces the model written in [7]. The geometry follows the models developed by Weibel [1] and Kitaoka et al [8]. The 3D numerical model has been made with the commercial code Ansys Gambit© [9].

The trachea has a length of 12 cm and a diameter of 1.8 cm . The bifurcation angle was set to 35° according to the guidelines given in [1, 8]. The geometry of the bifurcations in the bronchus at all the generations is created by a similar procedure. The diameter d and the length ℓ , deduced from the relations proposed by Kitaoka (levels 1, 2 and 3) and Weibel (rest of levels), are:

2a: ffrancos@unex.es

$$\begin{cases} d = 0.018 \exp(-0.388 n) & \text{if } n \leq 3 \\ d = 0.013 \exp[-(0.2929 - 0.00624 n)n] & \text{if } n > 3 \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} l = 0.12 \exp(-0.92 n) & \text{if } n \leq 3 \\ l = 0.025 \exp(-0.17 n) & \text{if } n > 3 \end{cases} \quad (3)$$

Half lung is presented in Figure 1. The numerical simulation of this complete morphology is simply unavoidable because the lung until level 16 has 65536 branches (Table 1).

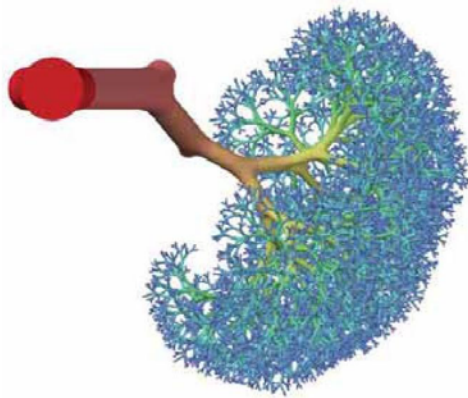


Fig 1. Complete morphology of the lung

Table 1. Main parameters of the branches

n	branche	diameter (mm)	length (mm)	branche (mm ²)	total (mm ²)
0	1	18.00	120.00	254.47	254
1	2	12.21	47.82	117.12	234
2	4	8.28	24.85	53.90	216
3	8	5.62	16.86	24.81	198
4	16	4.45	12.67	15.56	249
5	32	3.51	10.69	9.69	310
6	64	2.81	9.01	6.19	396
7	128	2.27	7.61	4.05	519
8	256	1.86	6.42	2.72	696
9	512	1.54	5.41	1.87	958
10	1024	1.30	4.57	1.32	1353
11	2048	1.10	3.85	0.96	1957
12	4096	0.95	3.25	0.71	2903
13	8192	0.83	2.74	0.54	4416
14	16384	0.73	2.31	0.42	6886
15	32768	0.65	1.95	0.34	11010
16	65536	0.59	1.65	0.28	18048

Figure 2 shows a global image of the model. The complete morphology of the lung can be generated from

this model by imposing symmetry at each of the branches.

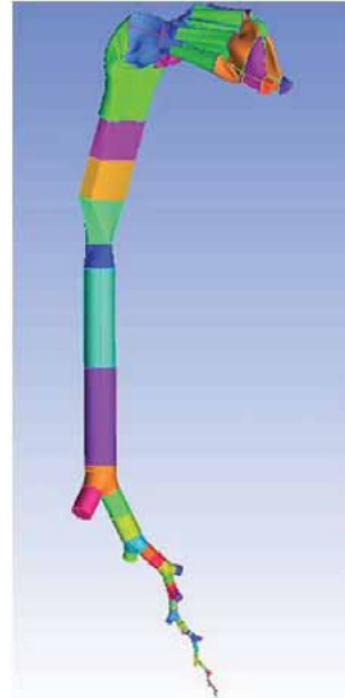


Fig 2. Numerical model geometry

3 Numerical model

A boundary layer mesh was built before meshing the volumes in order to obtain a better description of the boundary layer in the numerical calculations. The lung was meshed with tetrahedral cells due to their better adaptation to complex geometries, reducing its size while descending from the high-order to the low-order generations. The size of the tetrahedrons was consistent with the size of the boundary layer cells. The volume of the cells ranges between 2.96×10^{-12} and 2.01×10^{-10} m³. The maximum equiangle skew was restricted to 0.6 for 97.60% of the cells in the mesh. Figure 3 shows a detail of the mesh generated.

The total number of cells used to begin the simulations was about 10^6 , though other meshes of different size (2×10^6 and 4×10^6) were generated in order to investigate the dependence of the numerical predictions. As can be seen in Figure 4, the variation observed in the outlet static pressure rate when considering different mesh sizes is not very significant. If one compares 1,000,000 and 2,000,000 cells models with the 4,000,000 cells model, the relative deviation is 1.77% and 1.04% respectively.

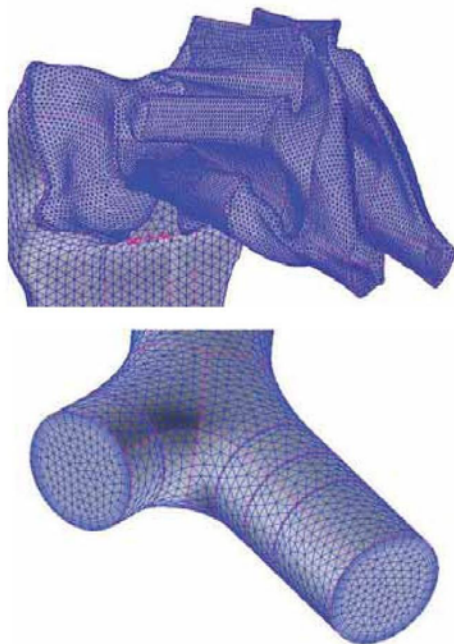


Fig 3. Detail of the mesh (nose and level 16th of the lung)

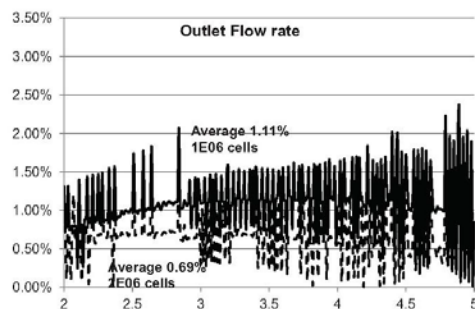


Fig 4. Results of the independence tests

The numerical simulations were performed with the code Ansys Fluent® [10]. This code was used to solve the full steady 3D Reynolds-averaged Navier-Stokes equations by the finite volume method. The fluid used in the calculations was air. The velocities will vary between 0.65 and 3.93 m/s at the trachea, so the Reynolds number is between 840 and 5050. The flow was considered as incompressible and turbulent. To effectively address both laminar and turbulent flow conditions, the model used for turbulent closure was the SST k- ω together with the transitional flows option to enable a low-Reynolds-number correction to the turbulent viscosity. This model provides a good approximation to transitional flows because the value of ω does not reach the zero value as

the laminar flow limit is approached. Furthermore, the turbulence is simulated all the way to the viscous sublayer, avoiding the use of standard wall functions, which are inaccurate for transitional flows. The pressure-velocity coupling was established by means of the SIMPLE algorithm. Second-order upwind discretizations were used for the convection terms and central difference discretizations were established for the diffusion terms. The y^+ values at all wall boundaries were maintained on the order of approximately 2 or less. This model has already been tested in the first step of this broad work [4].

A specific volume flow rate at the nose and a constant gauge pressure at the lowest generation were imposed as the boundary conditions. An additional user-defined function was used to impose a symmetric operation of the two branches at each bronchus. A detailed description of this UDF (which is about 400 lines long) is beyond the scope of this article. This UDF obtains the velocity profile at each open branch from the calculations and prescribes the same profile in the corresponding truncated branch. This methodology is repeated iteratively until achieving convergence in the flow field. Convergence was accepted with criteria of 0.00001 residuals for continuity and each velocity component in the momentum equation. Convergence required about 1,100 iterations and approximately 15 min CPU time in a cluster with 8 cores.

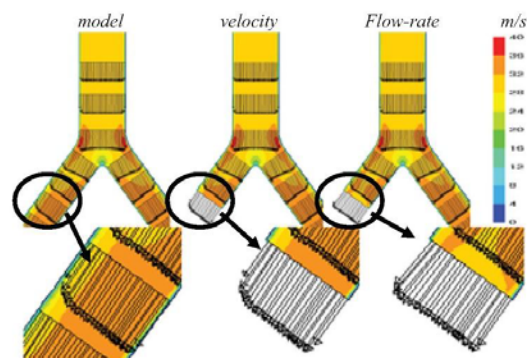


Fig 5. Outlet boundary conditions (velocity and flowrate)

Figure 5 shows a sample of this UDF. On the left there is a bifurcation in normal conditions, with uncut branches, showing the normal profile of the velocity field. On the middle is shown a bifurcation with the left branch truncated, using as boundary condition the velocity profile of the open branch and, on the right, the same but with the uniform flow-rate.

The particle trajectory equation can either be solved with the momentum and energy equations for the continuum flow (coupled) or after the momentum and energy equations have converged (uncoupled). The coupled option allows particles to interact with the flow fluid and affect the flow solution. In this case, the uncoupled option was chosen.

Once the static simulation finished, the Discrete Phase Model (DPM) was switched on to predict the trajectory

of discrete phase particles. To study particle deposition, the Lagrangian approach was used; particle trajectories were calculated within the steady flow fields of interest as a post processing step. Forces on the particles of interest include drag, pressure gradient, gravity, lift, and Brownian motion. To model the effects of turbulent fluctuations on particle motion, a random walk method was employed. The tracking parameters used were 50,000 for the “maximum number steps” and 5 for the “step length factor”.

Particles were introduced by means of an injection type called surface, specifying particle properties and velocity. Robinson [11] founded that 50,000 particles are necessary to minimize random variation in the deposition efficiency predictions due to the randomness of the particle position profile.

Deposition was determined by summing up the “trapped” fate particles, which occurs when their centre of mass touches the wall. Fluent reported the number of incomplete, aborted, or unable to be tracked particles. These numbers could be minimized by adjusting various input parameters

4 Results

The flow rates tested were 10, 30, and 60 ℓ/min , which are equivalent to different respiratory rhythms. The seeding conditions of the particles were:

- Inert material density: $1,000 \text{ kg/m}^3$.
- Particle size: $0.1 \mu\text{m}$, $0.5 \mu\text{m}$, $1 \mu\text{m}$, $2 \mu\text{m}$, $5 \mu\text{m}$, $10 \mu\text{m}$ and $20 \mu\text{m}$.
- Velocity: the same that air.
- Density 0.5%.
- Number of injected particles: 50,058.

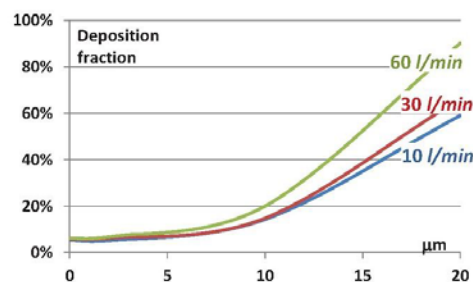


Fig 6. Relationship between particle size and lung deposition. Numerical results.

The regional deposition of particles can be quantified in terms of the deposition fraction (DF), defined as the mass ratio of deposited particles in a specific region to the particles entering the lung. Here (figure 6) is the ratio of the particles trapped in the first seven levels and entering the lung. These results agree with Dolovich [12] except in the range of particles between 0.1 and 2 microns, where numerical values are greater than those obtained experimentally.

Figures 7 and 8 show the concentration of the particles (kg/m^3) settled on the duct walls for a flow rate of 60 ℓ/min and for a size of $5 \mu\text{m}$. Red colour means high concentration of settled particles on the wall, and blue colour means absence of settled particles.



Fig 7. Particles concentration (kg/m^3).

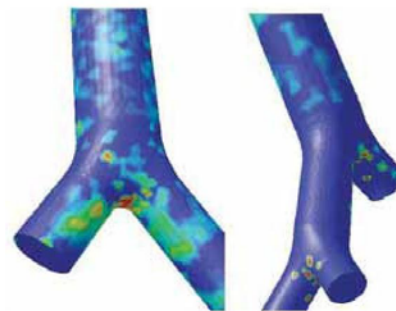


Fig 8. Particles concentration (kg/m^3).

As can be seen, most of the particles is retained in the nose and in the junction of the larynx and trachea, where the epiglottis.

The rest of particles travel through the lung. It can be seen how the UDF placed on truncated branches allows the exit of the particles, working the lung as if he had all the branches. According to the designed UDF, it can be said that the particle satisfies the task assigned, allowing to simulate the lung by means of an individual path.

5 Conclusions

This paper has explored a general methodology to simulate a model of a human lung. It has developed a complete and realistic model of the lower conductive zone of the lung (generations 0 to 16). This can be simulated within reasonable computational times. The operation of the 'truncated' airway is included in the simulations by means of a user-defined function. This function was used to: 1) obtain the velocity profile at each 'active' (open) branch, and 2) prescribe this profile in the truncated branch. This was useful to simulate the operation of the truncated branches at each bronchiole.

The distribution of particles in the lung airways depends of its size. Small particles are distributed more uniformly than bigger particles, which follow the mean flow. The main objective of this work, to study the particle deposition from the mouth to the level 16 using a mixture of particles of different sizes has been achieved. Due to the high number of branches (131,072), it is necessary to work with a single pathway, so the boundary conditions applied in the truncated branches are very important. It can be concluded that the numerical model presented in this paper and the user-defined function routine included to account for the operation of the truncated branches can be satisfactorily used to simulate the real operation of a human lung over the entire breathing cycle. This model provided a realistic description of the operation of the lung while avoiding too large computational costs.

Our future efforts will focus in the simulation of several pulmonary diseases (bronchitis, emphysema, etc.).

Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge the financial support provided by Gobierno de Extremadura and FEDER under project GR10047 and also by Ministerio de Economía y Competitividad under project DPI 2010-21103-C04-04

References

1. E R Weibel, *Morphometry of the human lung*, Springer-Verlag (1963)
2. G Tian, P W Longest, G Su and M Hindle. Characterization of Respiratory Drug Delivery with Enhanced Condensational Growth using an Individual Path Model of the Entire Tracheobronchial Airways, *Annals of Biomedical Engineering*, 2011, Volume 39, Number 3, Pages 1136-1153.
3. D K Walters and W H. Luke. A Method for Three-Dimensional Navier--Stokes Simulations of Large-Scale Regions of the Human Lung Airway, *J. Fluids Eng.* 132, 051101 (2010).
4. A F Tena, P Casan, A Marcos, R Barrio, E Blanco. Analysis of the fluid dynamic characteristics of the obstructive pulmonary diseases using a three-dimensional CFD model of the upper conductive zone of the lung airways. *Proceedings of the SIMBIO 2011*, Brussels, (Belgique), 2011.
5. A F Tena, P Casan, J Fernáz, A Marcos, R Barrio. Numerical simulation of the nano particle deposition using a three-dimensional model of lung airways. *Conference on Modelling Fluid Flow (CMFF'12)*, Budapest, Hungary, 2012.
6. P Castro-Ruiz F. Castro-Ruiz, A. Costas-López, C. Cenjor-Español. Computational fluid dynamics simulations of the airflow in the human nasal cavity. *Acta Otorrinolaringol Esp* 2005; 56: 403-410.
7. M Brouns, S T. Jayarajul, C Lacor, J De Mey, M Noppen, W Vincken, and S Verbanck. Tracheal stenosis: a flow dynamics study. *Journal of Applied Physiology* March 2007 vol. 102 no. 3 1178-1184.
8. H Kitaoka H, R Takaki, B Suki. A three-dimensional model of the human tree. *J. Applied Physiology*. 1999; 87: 2207-2217.
9. *Gambit version 2.4.6*, 2006. ©ANSYS Inc.
10. *Fluent version 6.3.26*, 2006. ©ANSYS Inc.
11. Robinson, R. J., Oldham, M. J., Clinkenbeard, R. E., and Rai, P. 2006. Experimental and numerical analysis of a 7 generation human replica tracheobronchial model. *Ann. Biomed. Eng.* 34(3):373-383.
12. Dolovich MB, Newhouse MT. *Aerosols. Generation, methods of administration, and therapeutic applications in asthma*. In *Allergy. Principles and practice*, 4th edn, eds Middleton E Jr, Reed CE, Ellis EF, Adkinson NF Jr, Yunginger JW, Busse WW. St Louis: Mosby Year Book, Inc., 1993; 712-739.

FLUID DYNAMIC ANALYSIS OF THE DEPOSITION PARTICLES IN THE FIRSTS BRANCHES OF THE LUNG AIRWAYS USING A THREE DIMENSIONAL CFD MODEL

Ana F. Tena⁽¹⁾, Pere Casan⁽¹⁾, Alfonso Marcos⁽²⁾, Raúl Barrio⁽³⁾, Eduardo Blanco⁽³⁾

⁽¹⁾ Instituto Nacional de Silicosis, C/ Dr Bellmunt, 33006 Oviedo, Spain.
e-mail: anafertena@gmail.com

⁽²⁾ Dpto de IMEM, Universidad de Extremadura. Avda. de Elvas s/n, 06006 Badajoz, Spain.
e-mail: acmarcos@unex.es

⁽³⁾ Dpto de Energía, Universidad de Oviedo. Campus de Viesques s/n, 33203 Gijón, Spain.
e-mail: eblanco@uniovi.es

1. Introduction. One of main health problems to the urban population is the exposure to air pollution. Suspended particles (made up of soot, smoke, dust and liquid droplets) can cause a wide range of chronic respiratory illness such as asthma and chronic obstructive pulmonary diseases, as well as worsening heart conditions and other conditions.

To know the particle depositions in realistic models of the human respiratory system is fundamental to prevent these diseases, and this is the objective of this work.

2. Methodology. A 3D numerical model of the bronchial tree has been developed, from the trachea to the sixth level bronchioles. The geometry follows the model developed by Weibel [1]. It has been discretized with a mesh of about one million cells. The Navier-Stokes equations have been solved with a commercial CFD finite volume code [2].

3. Results. The distribution of particles in the lung airways depends of its size. Small particles are distributed more uniformly than heavy particles, which follow the mean flow

4. Referencias.

- [1] E.R. Weibel, Morphometry of the human lung, Springer-Verlag (1963).
- [2] C. Kleinstreuer and Z. Zhang, Airflow and Particle Transport in the Human Respiratory System, Annual Review of Fluid Mechanics 2010. 42:301–34.
- [3] Fluent version 6.3.26 (2006). ©ANSYS Inc. All Rights Reserved.

Acknowledgments.

The authors gratefully acknowledge the financial support of the FEDER and Junta de Extremadura under Project GR10047.

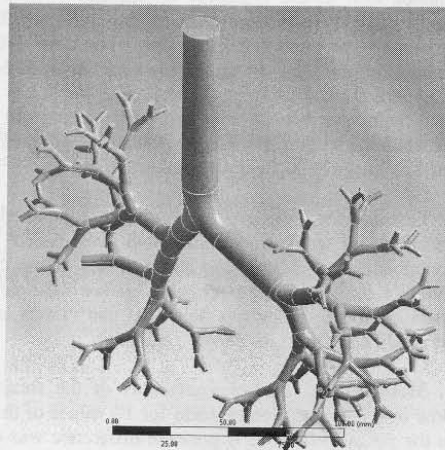


Figure 1. Numerical model geometry from the trachea to the 6th order bronchioles

Fluid dynamic analysis of the deposition particles in the first branches of the lung airways using a three dimensional CFD model

Ana F. Tena⁽¹⁾, Pere Casan⁽¹⁾, Alfonso Marcos⁽²⁾,
Raúl Barrio⁽³⁾, Eduardo Blanco⁽³⁾

⁽¹⁾ Instituto Nacional de Silicosis, C/ Dr Bellmunt, 33006 Oviedo, Spain.
E-mail: anafertena@gmail.com

⁽²⁾ Dpto de IMEM, Universidad de Extremadura, Avda. de Elvas s/n, 06006 Badajoz, Spain.
E-mail: acmarcos@unex.es

⁽³⁾ Dpto de Energía, Universidad de Oviedo, Campus de Viesques s/n, 33203 Gijón, Spain.
E-mail: eblanco@uniovi.es

1. Introduction

One of main health problems in the urban population is the exposure to air pollution. The Spanish urban air [1] has an average airborne concentration of 300-400 ppm, consisting on 15% of particles from tyre wear, 35% of particles from engines, 30% of NO_x+S and 15% of particles from building works. These suspended particles can cause a wide range of chronic respiratory illness such as asthma and chronic obstructive pulmonary diseases, as well as worsening heart conditions and other pathologies.

Knowing the particle deposition in realistic models of the human respiratory system is fundamental to prevent these diseases, and this is the objective of this work.

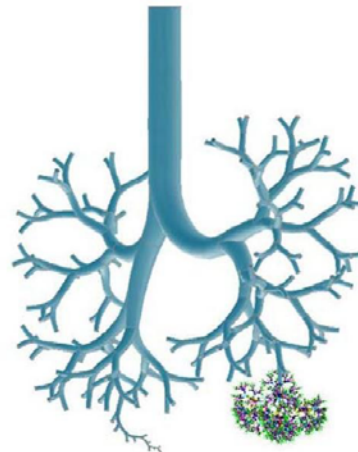


Figure 1. Numerical model geometry from the trachea to the 7th order bronchioles.

2. Methodology

A 3D numerical model of the bronchial tree has been developed, from the trachea to the seventh generation bronchioles. The geometry follows the models developed by Kitaoka [2] and Weibel [3].

According to these rules, it was built the model showed in the figure 1, which has been discretized with an unstructured mesh of about 1.5×10^6 cells. The volume of the cells ranges between 9.96×10^{-14} and 6.14×10^{-9} . The maximum equiangle skew was restricted to 0.6 for 97.06% of the cells in the mesh.

The numerical simulations were performed with the code Ansys Fluent [4]. This code was used to solve the full steady 3D Reynolds-averaged Navier-Stokes equations by the finite volume method. The fluid used in the calculations was air. The flow was considered as incompressible and turbulent (the model used for turbulent closure was the realizable k-epsilon together with logarithmic wall functions to resolve the flow variables in the boundary layer region). The pressure-velocity coupling was established by means of the SIMPLE algorithm. Second-order upwind discretizations were used for the convection terms and central difference discretizations were established for the diffusion terms.

Once the static simulation has finished, the Discrete Phase Model (DPM) is switched on to calculate the distribution of inhaled particles.

The flow rates tested were 6, 12, 18, 24, 60 and 95 l/min, which are equivalent to the different respiratory rhythms. The seeding conditions of the particles were:

- Inert material: coal and similar, density 2000 kg/m^3
- Particle size: 11 pm, 1 nm, $1 \mu\text{m}$, $5 \mu\text{m}$, $10 \mu\text{m}$ y $50 \mu\text{m}$
- Velocity: the same that air

In all cases, the seeding density was 0.5%.

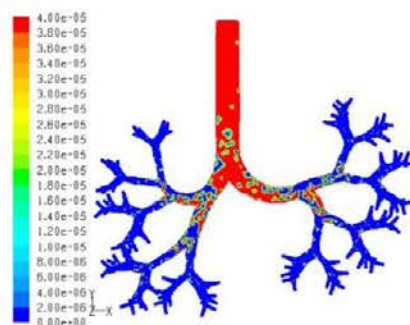


Fig. 2: Flowrate 60 l/min, size 1 pm

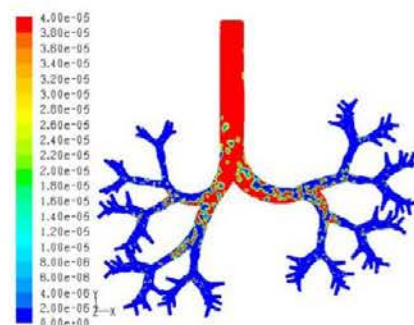


Fig. 3 Flowrate 60 l/min, size 1 nm

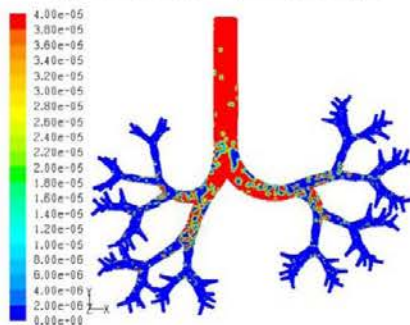


Fig. 4: Flowrate 60 l/min, size $1 \mu\text{m}$

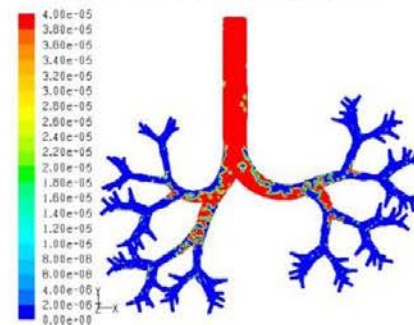


Fig. 5: Flowrate 60 l/min, size $5 \mu\text{m}$

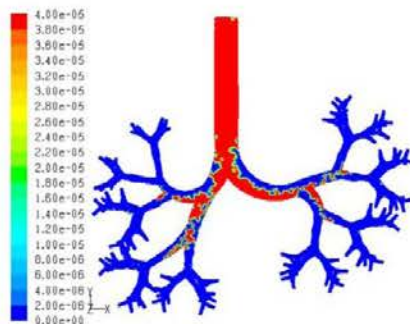


Fig. 6: Flowrate 60 l/min, size $10 \mu\text{m}$

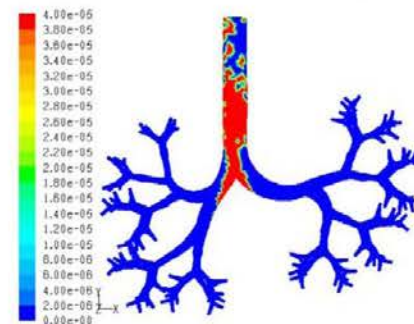


Fig. 7: Flowrate 60 l/min, size $50 \mu\text{m}$

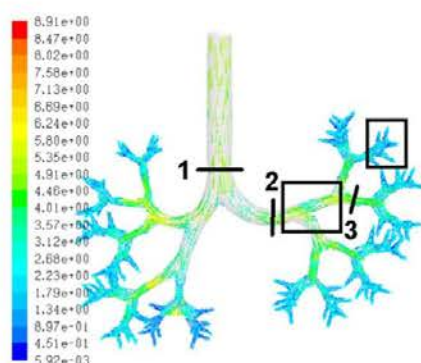


Fig. 8: Flowrate 60 l/min

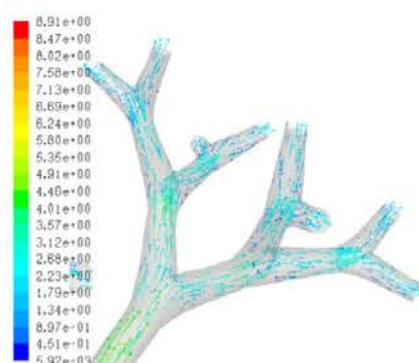


Fig. 9: Flowrate 60 l/min

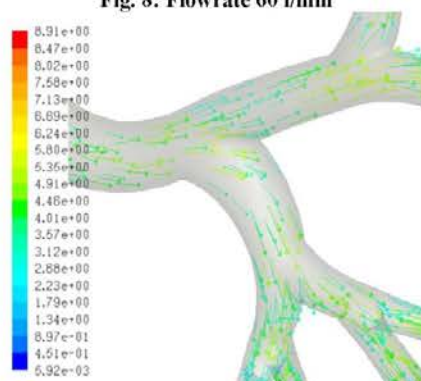


Fig. 10: Flowrate 60 l/min

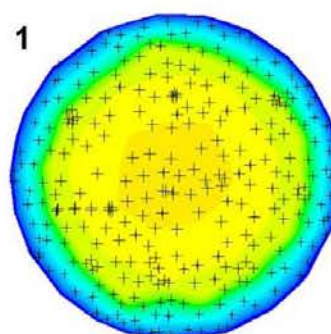


Fig. 11: Flowrate 60 l/min

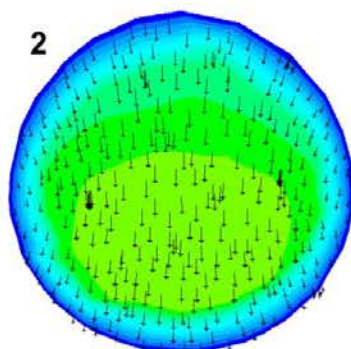


Fig. 12: Flowrate 60 l/min

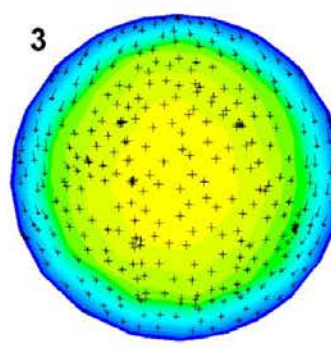


Fig. 13: Flowrate 60 l/min

3. Results

Figures 2 to 7 show the concentration of the particles (kg/m^2) settled on the duct walls for a flow rate of 60 l/min and for all size of particles. Red color means “high concentration” of settled particles on the wall, and blue color means absence of settled particles. Figure 8 shows the velocity vectors in the ducts,

and figures 9 and 10 show two areas belonging to the generations 1 and 4 to 7. Figures 11, 12 and 13 show the velocity contours and vectors in a transversal section (figure 8) of the generations 0, 1 and 3.

In figures 2 to 7 it can be observed that the number of escaped particles decreases when the particle size increases. This is due to the gravitational force, which also increases, forcing the particles to settle on the walls. In this figures it also can be observed that the red areas reach far regions as the particles are littler. The figure 14 is a summary of these figures and the rest of the flowrates. As greater the respiratory rhythm and the particles are (more gravitational force), there are more quantity of trapped particles, and therefore, less quantity of escaped particles.

Figures 11, 12 and 13 suggest that the behavior of the particles in the airways is similar to the cars in a road. In the straight, the distribution of the particles is uniform in the section, while in the curves, due to the gravitational force, the particles tend to attach to the external wall.

Figure 15 compares the obtained velocities with the suggested by Hofman [5]. Three respiration rhythms were compared, and the results are very agreed. In both cases, the velocity increases in the third generation. After this point, the velocity diminishes with a greater slope as greater the respiratory rhythm is.

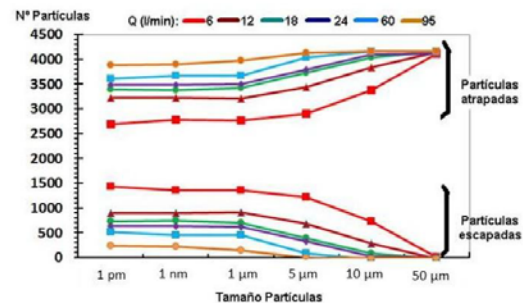


Fig 14: Behaviour of the particles according to the size and flowrate

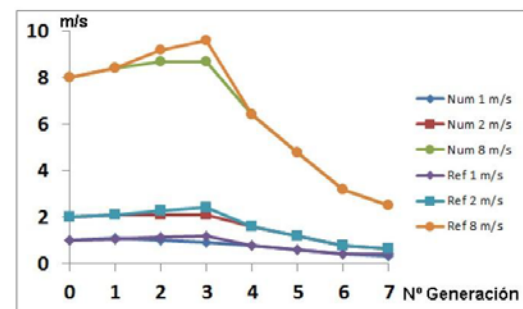


Fig 15: Velocity of the particles according to the generation number

Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge the financial support of the FEDER and Junta de Extremadura under Project GR10047.

Referencias

- [1] Querol, X., Calidad del aire, partículas en suspensión y metales, Rev Esp Salud Pública 2008; 82: 447-454.
- [2] Kitaoka H, Takaki R, Suki B. A three-dimensional model of the human tree. J. Applied Physiology. 1999; 87: 2207-2217
- [3] E.R. Weibel, Morphometry of the human lung, Springer-Verlag (1963)
- [4] Fluent version 6.3.26 (2006). ©ANSYS Inc. All Rights Reserved.
- [5] Hofmann W, Martonen TB, Graham RC. Predicted deposition of nonhygroscopic aerosols in the human lung as a function of subject age. J Aerosol Med 1989; 2:49-68.

Proceedings of the ECCOMAS Thematic International Conference on
Simulation and Modeling of Biological Flows (SIMBIO 2011)
September 21-23, 2011, VUB, Brussels, Belgium

Analysis of the fluid dynamic characteristics of the obstructive pulmonary diseases using a three-dimensional cfd model of the upper conductive zone of the lung airways.

Ana F. Tena¹, Pere Casan¹, Alfonso Marcos², Raúl Barrio³ Eduardo Blanco³

¹ I. Nacional de Silicosis. C/ Dr Bellmunt. 33006 Oviedo, Spain. E-mail: anafertena@gmail.com, pcasan@ins.es

² Universidad de Extremadura. Avda de Elvas, 06071 Badajoz, Spain. E-mail: acmarcos@unex.es

³ Universidad de Oviedo. C. de Viesques 33203 Gijón, Spain. E-mail: barrioraul@uniovi.es; eblanco@uniovi.es

Abstract

The main objective of this work is the analysis of the fluid dynamic characteristics of the obstructive pulmonary diseases (Chronic Obstructive Pulmonary Disease, COPD, bronchitis and emphysema). Its obstructive pattern can be easily detected in the spirometry, but they usually need more complex tests to distinguish between them. However, their fluid dynamic features are quite different.

A 3D numerical model of the bronchial tree has been developed, from the trachea to the seventh level bronchioles, following the model developed by Weibel and Kitaoka. The main innovation in the numerical model is the unsteady boundary conditions applied and an adaptive time step, using two User Defined Function (UDF). The analysis of the results obtained varying the geometry and the unsteady boundary conditions, allows the characterization of the particular fluid dynamic phenomenon of each disease and how it is perceived in the tests.

Keywords: obstructive pulmonary disease, spirometry, CFD.

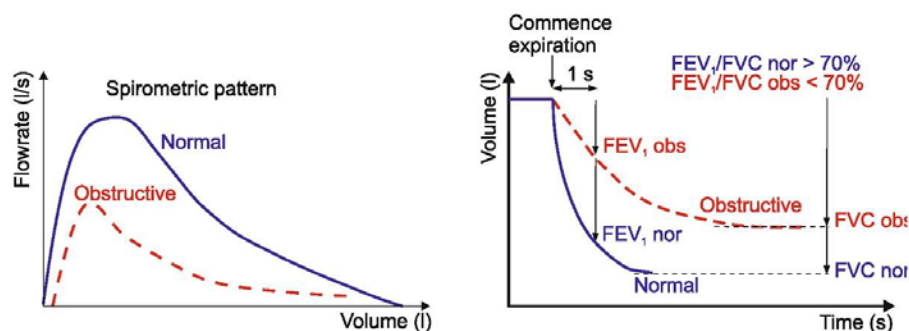


Fig.1 Normal and obstructive curves obtained in the forced spirometry test

Introduction

Lung diseases with an obstructive diagnosis are, basically, COPD (Chronic Obstructive Pulmonary Disease, both bronchitis and emphysema), and asthma although some other diseases and entities as tumors can also hinder the air flow. Its obstructive pattern can be easily detected in the spirometry (figure 1), but they usually need more complex tests to distinguish between them. However, their fluid dynamic features are quite different.

The distinctive attribute between COPD and asthma is the chronic quality of the first. A nearly normal

pulmonary function can be observed in asthma patients after a bronchodilator treatment.

The main fluid dynamic effect in bronchitis is produced by the section reduction of the airways, mainly due to the chronic inflammation. The pressure loss increases and the flow rate diminish, mainly during the first second, when air velocity is the highest. As the global airways section increases going down the bronchial tree, is to be expected that the obstruction of the lower order branches is the most significant part of the phenomena. As the flow can be considered laminar, at

least in the less severe phase of the illness, the pressure loss should be more or less proportional to the flow rate. The presence of an obstruction originated by a tumor, on the other hand, can be considered as a singular pressure loss, and influenced by the square of the flow rate.

The respiratory obstruction generated by emphysema has a completely different source: the pressure driving the flow during the expiratory maneuver is due to the elastic lung recoil; in emphysema, the loss of elastic tissue elements reduces this pressure, hampering the lungs deflation [1].

A normal description of the human lung with 24 branches must have 16 million of segments (2^{24}). A full CFD resolution requires an estimated mesh size of thousands of millions of elements. CFD simulations have been limited to relatively small subsections of the lung geometry, being the flow in the lower airways either ignored or modeled using simple 1D or axisymmetric approximations. The earliest morphological description of the lung was the symmetric model of Weibel [2]. A complementary alternative was proposed by Kitaoka et al. [3]. Now, there are several models, most of them derived from these. Realistic morphologies for lung airways up to nine branches can be obtained using CT-scan and MRI techniques [4, 5].

Several works have demonstrated the complexity of the pulmonary flow. Zhang and Kleinstreuer [6] performed CFD simulations in a four-generation symmetric branching model and found that unsteady typical flow of normal breathing led to different flow features than in the steady state case, being greater during high frequency ventilation. Luo et al. [7] investigated the effect of COPD on particle deposition in the upper lung airways for a symmetric four-generation model. Yang et al. [8] worked with a three-generation airway model for both healthy and COPD cases, and found that the velocity profile entering the segments has great influence on flow patterns and pressure drop.

The main innovation in this numerical model is the unsteady boundary conditions applied [9, 10]. Volume and flow rate (vs. time) real data have been obtained from forced spirometry tests of patients without obstructive pulmonary diseases. This data has been used with the model to obtain the pressure vs. volume and pressure vs. time patterns at the end of the smaller bronchioles studied. Then, with these boundary conditions, were made simulations under obstructive pulmonary diseases (bronchitis and emphysema). The analysis of the results obtained varying the geometry and the unsteady boundary conditions, allows the characterization of the particular fluid dynamic phenomenon of each disease and how it is perceived in the tests.

Methodology and numerical model

Few forced spirometry tests of patients without obstructive pulmonary diseases were realized to simulate

realistic conditions. From these data relations between volume, flow rate and time have been obtained (Fig. 2).

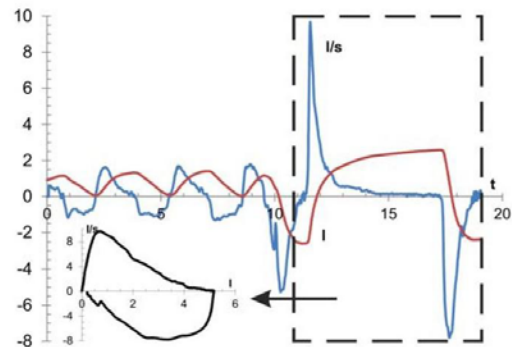


Fig.2 Forced spirometry tests.

A 3D numerical model of the bronchial tree has been developed, from the trachea to the seventh level bronchioles. The geometry follows the model developed by Weibel [2] and Kitaoka et al [3]. The dimensions of the built model can be seen in table 1.

Table 1: model dimensions

Gen	Branches	Diam (m)	Length (m)	Area (m ²)
0	1	0.018	0.12	0.000254469
1	2	0.012211422	0.047822285	0.000117118
2	4	0.00828438	0.019058091	5.39026E-05
3	8	0.005620225	0.007595012	2.48083E-05
4	16	0.00445127	0.012665425	1.55617E-05
5	32	0.003512926	0.010685373	9.69232E-06
6	64	0.002807205	0.009014874	6.18925E-06
7	128	0.002271429	0.007605532	4.05218E-06

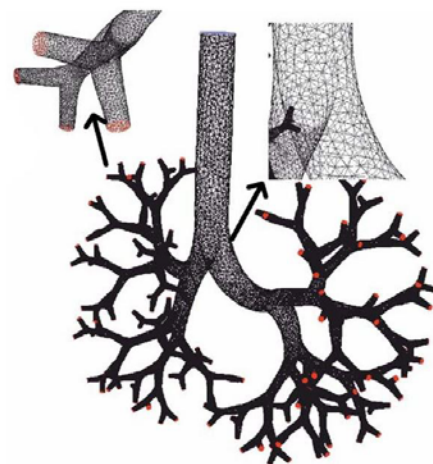


Fig.3 Numerical model and detail of the surface mesh.

Figure 3 shows a global image of the unstructured mesh generated. The total number of cells used to begin with the simulations was about 10^6 , though other meshes of different size ($2 \cdot 10^6$ and $4 \cdot 10^6$) were generated in order to investigate the dependence of the numerical predictions. As can be seen in Fig 4, the variation observed in the outlet flow rate when considering different mesh sizes is not very significant. For the mesh size used for the calculations (about 1,000,000 cells) this variation is lower than 1.11%, and with 2,000,000 cells is lower than 0.67% compared with the model of 4,000,000 cells.

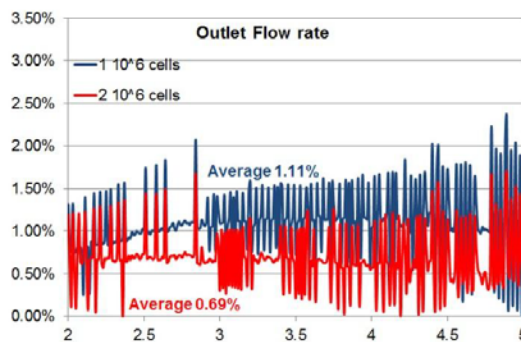


Fig.4 Results of the independence tests.

The maximum equiangle skew was restricted below 0.6 for 98% of the cells in the mesh.

The numerical simulations were performed with the code Ansys Fluent [11]. This code was used to solve the full unsteady 3D Navier-Stokes equations by the finite volume method. Air is the working fluid with a constant density of 1.225 kg/m^3 and dynamic viscosity of $1.7894 \cdot 10^{-5} \text{ kg/(m s)}$.

The boundary conditions imposed were firstly an unsteady velocity distribution (using a User Defined Function) at the inlet (G0, trachea) and gauge static pressure at the outlet (G7).

The number of time steps was 400. Due to non-uniformity of breathing cycle, it was applied an adaptive time step method by means of the before User Defined Function. The number of iterations in each time step was adjusted to reduce the magnitude of the residuals below an acceptable level. The residuals converged quickly and reached negligible magnitudes.

The time required for each simulation was 4 days working in parallel with 4 cores. Over 5 breathing cycles are necessary to achieve the periodic unsteady solution convergence.

Figure 5 shows the inlet boundary condition (unsteady flow rate) obtained from a forced spirometry test, and the unsteady pressure pick-up from the simulation.

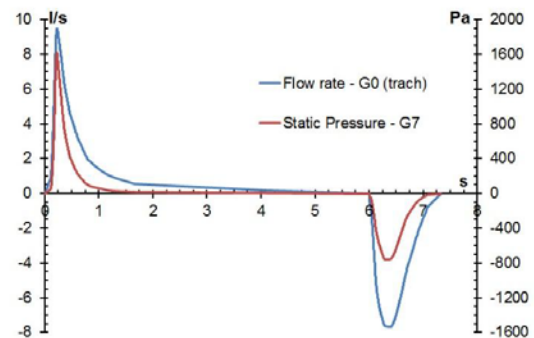


Fig.5 Unsteady flow rate imposed and static pressure obtained.

One way to check if the simulation is right is to repeat the test, but in this case the unsteady pressure obtained before as inlet boundary condition (G7) and see if it matches the obtained unsteady output velocity (G0, trachea) with the first valor (fig. 6). Results look like rights.

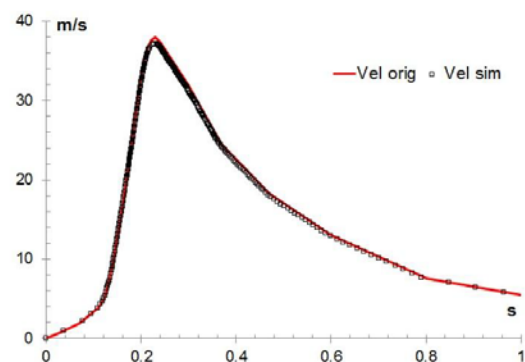


Fig.6. Real and simulated velocities in the trachea (G0)

To simulate the COPD conditions (bronchitis and emphysema) the unsteady total pressure obtained in the past step is imposed as the inlet (G7) boundary condition using an udf whereas a gauge pressure is established as the outlet boundary condition. In the case of bronchitis, the roughness of the walls was increased, whereas in the case of emphysema, a branch of order 3 was closed, which is equivalent to having 1/8 of inoperable lung.

Results

First of all, the results will be compared with those existing in the literature. Hofmann et al [12] say that the velocity is increasing in the first branches, from the

branch 0 (trachea) to branch 3. Rest of the branches, from G4 to 24, the velocity is decreasing.

The total sections of the built model are in the table 2. Figure 7 shows the velocity magnitude obtained in the simulation in the different pulmonary branches for a healthy lung. From the G0 (trachea) to G3 the velocity is increasing, whereas in the rest is decreasing. Therefore, both results are in agreement.

Table 2: Variation of the total section in the airways

Gen	Total area (m ²)	Gen	Total area (m ²)
0	0.00025447	4	0.00024899
1	0.00023424	5	0.00031015
2	0.00021561	6	0.00039611
3	0.00019847	7	0.00051868

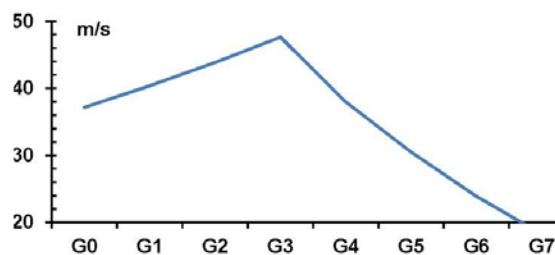


Fig.7. Velocity magnitude in the pulmonary branches

Figure 8 shows the pathlines from G7 to the trachea (G0) colored by inlet surface, and the velocity vectors in first 3 branches at a given moment of the expiratory flow.

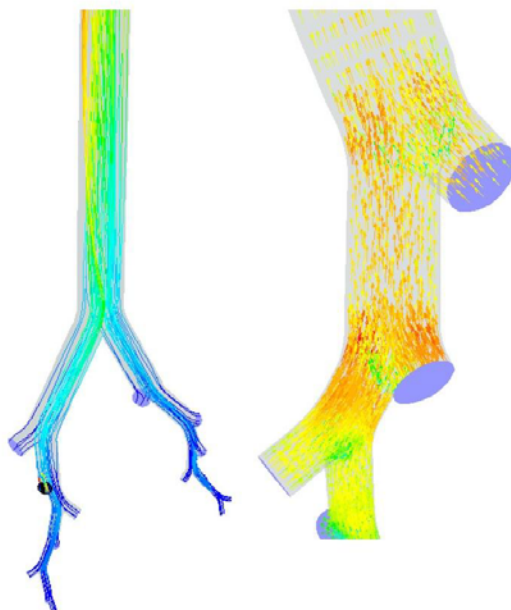


Fig.8. Pathlines from G7 to G0 in two branches and velocity vector in first 3 branches.

For the same flow conditions, Figure 9 shows the contours of velocity in cross sections of different branches, in the sense of clockwise. In general, the flow is axisymmetric, with predominant axial component of velocity.

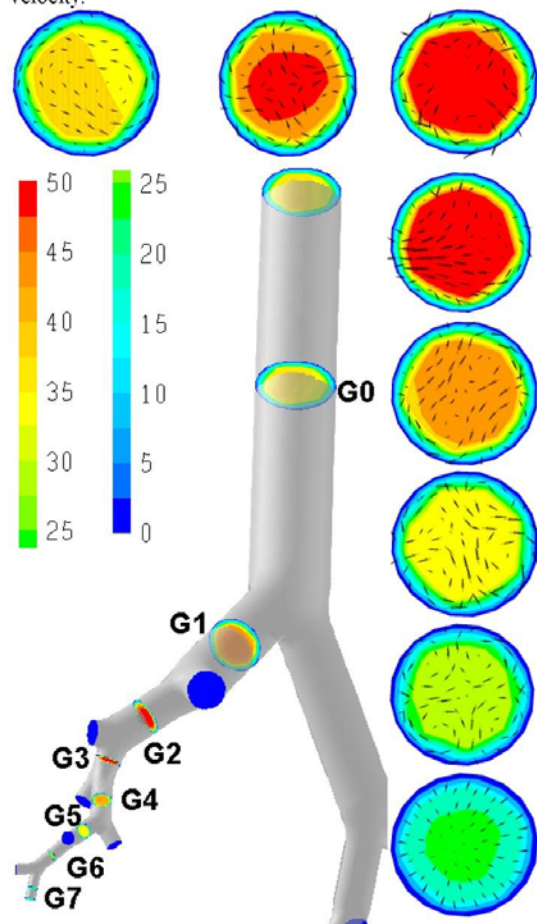


Fig.9. Contours of velocity in cross sections of different branches.

Figure 10 shows the unsteady velocity in the trachea (G0) for the three study cases, with the same inlet boundary condition (static pressure), as has been said previously. The conditions imposed to simulate bronchitis and emphysema correspond, in this first study, a mild conditions. The simulation perfectly captures these situations, with results similar to those obtained by spirometry tests. The spirometry results are shown as graphics of flow rate versus volume and volume versus time. To obtain these values, previous results are

integrated, being shown in Figures 11 (flow rate vs volume) and 12 (volume vs time).

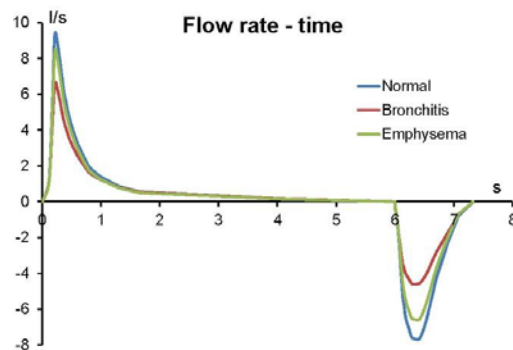


Fig.10. Velocity magnitude in the pulmonary branches

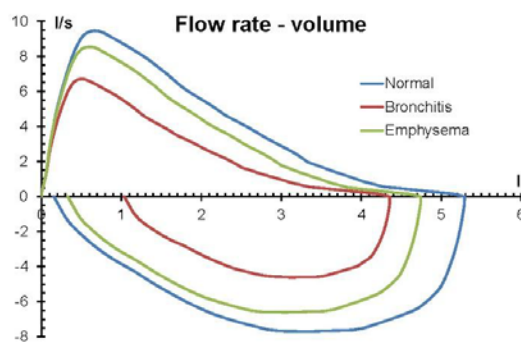


Fig.11. Flowrate versus volume.

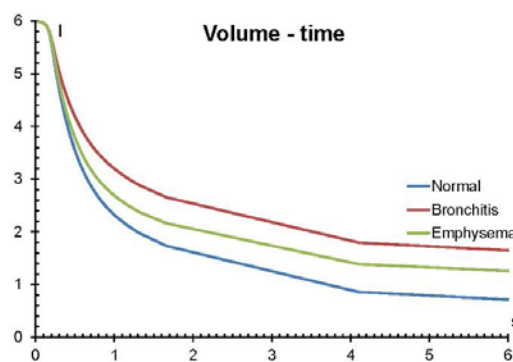


Fig.12. Volume versus time.

From these data it can be obtained the most used parameters in pneumological studies (FVC, Forced Vital Capacity; FVC_1 , Forced Expiratory Volume in first second; FEF_{25-75} , Forced Expiratory Flow at 25% point to the 75% point of Forced Vital Capacity; PEF, Peak Expiratory Flow). Table 3 shows these parameters.

Table 3

	Normal	Bronchitis	Emphysema
FVC	5.29	4.35	4.74
FVC_1	3.69	2.81	3.29
PEF	9.46	6.70	8.54
FVC_1/FVC	72.68%	64.56%	69.34%

Conclusions

A numerical study of lung diseases with an obstructive diagnosis (COPD) was made using unsteady boundary conditions. These boundary conditions were imposed by means of two User Defined Functions (UDF's), one to obtain the unsteady pressure in the branch G7 and the other to obtain the spirometry data in the three study cases.

Once verified the functioning of the model, further studies will be directed to simulate different cases of existing spirometry.

Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge the financial support provided by Junta de Extremadura and FEDER under project GR10047 and also by Ministerio de Ciencia e Innovación under project DPI 2010-21103-C04-04.

References

- [1] R.J. Altieri and D.C. Thompson, Physiology and Pharmacology of the Airways. In: Inhalation Aerosols, 2d Edition, Informa Healthcare (2007).
- [2] E.R. Weibel, Morphometry of the human lung, Springer-Verlag (1963).
- [3] Kitaoka, H., Takaki, R., and Suki, B., 1999, "A Three Dimensional Model of the Human Airway Tree" J. Appl. Physiol., 87(6), pp. 2207–2217.
- [4] Sera, T., Fujioka, H., Yokota, H., Makinouchi, A., Himeno, R., Schroter, R. C., and Tanishita, K., 2003, "Three-Dimensional Visualization and Morphometry of Small Airways From Microfocal X-Ray Computed Tomography," J. Biomech., 36(11), pp. 1587–1594.
- [5] Burton, R. T., Isaacs, K. K., Fleming, J. S., and Martonen, T. B., 2004, "Computer Reconstruction of a Human Lung Boundary Model From Magnetic Resonance Images," Respir. Care, 49(2), pp. 180–185.
- [6] Zhang, Z., and Kleinstreuer, C., 2011, "Computational analysis of airflow and nano particle deposition in a combined nasal–oral–

- tracheobronchial airway model," *Journal of Aerosol Science* 42, pp. 174–194.
- [7] Luo, H. Y., Liu, Y., and Yang, X. L., 2007, "Particle Deposition in Obstructed Airways," *J. Biomech.*, 40(14), pp. 3096–3104.
 - [8] Yang, X. L., Liu, Y., So, R. M. C., and Yang, J. M., 2006, "The Effect of Inlet Velocity Profile on the Bifurcation COPD Airway Flow," *Comput. Biol. Med.*, 36(2), pp. 181–194.
 - [9] R.K. Freitas and W. Schröder, 2008, Numerical investigation of the three-dimensional flow in a human lung model, *Journal of Biomechanics* 41, pp. 2446–2457.
 - [10] C-L. Lin, M.H. Tawhai, G. McLennan, E.A. Hoffman, 2009, Multiscale simulation of gas flow in subject-specific models of the human lung, *IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine* 28(3), pp. 25–33.
 - [11] Fluent Inc. User's Guide, 2006, 10 Cavendish Court, Lebanon, NH03766.
 - [12] Hofmann W, Martonen TB, Graham RC. Predicted deposition of nonhygroscopic aerosols in the human lung as a function of subject age. *J Aerosol Med* 1989; 2:49–68.
 - [13] Agustí, A. G. N. 1995, *Función pulmonar aplicada: puntos clave*. Mosby/Doyma Libros, Barcelona.

NUEVA METODOLOGÍA PARA LA GENERACIÓN DE LA GEOMETRÍA DE LA ZONA CONDUCTIVA INFERIOR DE LAS VÍAS RESPIRATORIAS DEL PULMÓN

Alfonso Carlos Marcos, Alberto Marcos

Universidad de Extremadura

Ana F. Tena, Pere Casans

Instituto Nacional de Silicosis de Asturias

Raúl Barrio

Universidad de Oviedo

Abstract

The morphology of the human lung consists of a series of dichotomous bifurcations that result in a complex branching network. Several idealized descriptions of this morphology have been proposed in the technical literature in order to generate relative simple geometries than can be used to resolve the flow with a proper CFD code. However, the simulation of the entire lung excluding the alveolar region is still beyond the actual computational capacities.

This paper presents a general methodology for the development and simulation of a human lung between scales 0-16.

The methodology, based on the morphologies proposed by Weibel, pays special attention to the division in each bronchiole. The main objective of the investigation is to develop a simplified morphology of the lung that can allow resolving the flow at all scales simultaneously while avoiding prohibitive mesh sizes and computational times. The methodology is based on the simulation of only one of the two possible branches in each bronchiole.

Keywords: *lungs, geometry, engineering graphics, computational fluid dynamics*

Resumen

La morfología del pulmón humano se compone de una serie de bifurcaciones dicotómicas que se traducen en una compleja red. Existen varias descripciones idealizadas de esta morfología, como se puede comprobar la literatura existente, con el fin de generar geometrías sencillas que puedan ser utilizadas para calcular el flujo mediante técnicas numéricas, en este caso, mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). Aun así, la simulación del pulmón completo sigue siendo superior a la capacidad de cálculo actual.

En este artículo se expone un procedimiento para desarrollar un modelo geométrico del pulmón desde la tráquea a la región alveolar (generaciones 0-16). La metodología, basada en la morfología propuesta por Weibel, se centra en las bifurcaciones de los bronquiolos. El objetivo principal de este trabajo es obtener un modelo sencillo del pulmón que determine el flujo en todas las generaciones, evitando un tamaño de malla prohibitivo que necesitaría un gran tiempo de computación. Se considera que el modelo es simétrico en cada uno de los

bronquios, con el fin de determinar el flujo a lo largo de uno de los dos posibles caminos en la bifurcación.

Palabras clave: pulmones; geometría; ingeniería gráfica; dinámica de fluidos computacional

1. Introducción

El estudio del intercambio de aire en el sistema respiratorio humano juega un papel muy importante en medicina e ingeniería biomédica. El mayor interés en este campo de investigación se centra en la aplicación de aerosoles, diagnóstico de enfermedades pulmonares y fenómenos de ventilación de alta frecuencia. Aunque los procesos químicos y la función general del sistema respiratorio están bien estudiados, aún representa un desafío la correcta descripción de la mecánica del fluido en este intercambio de gases. Esto es debido a que el pulmón humano tiene una forma extremadamente compleja, asimétrica e irregular e incluso varía de unos individuos a otros. Los bronquios y bronquiolos que recorren el interior de los pulmones conforman una red de conductos extensa y compleja desde la tráquea hasta sus últimas ramificaciones (Sera et al., 2003; Burton et al., 2004).

En lo relativo a estudios experimentales, las simulaciones computacionales son métodos baratos no invasivos para obtener datos del flujo en el pulmón humano en investigación y para propósitos clínicos. Las simulaciones CFD (Computational Fluid Dynamics) tridimensionales permiten información detallada para estudiar las impedancias, distribuciones de flujo másico, deposición local de partículas, y proporcionan un medio para examinar los efectos de condiciones anormales o patológicas.

Las técnicas CFD se basan en utilizar ordenadores para la simulación del movimiento de los fluidos y otros fenómenos asociados como la transferencia de calor, las reacciones químicas, el arrastre de sólidos.... Para ello CFD se basa en métodos numéricos y algoritmos resolviendo y analizando así problemas relacionados con los fluidos.

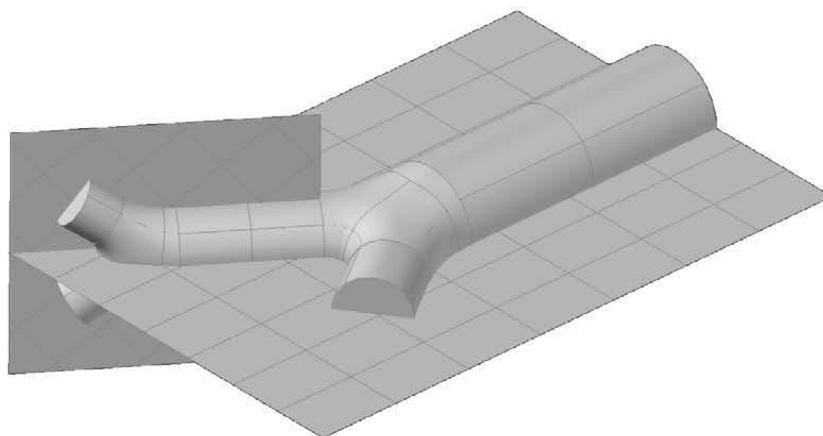
Sin embargo, la simulación del pulmón por completo excede aún las capacidades de proceso computacional actuales y es por lo que se suele recurrir a simplificaciones para llevarlas a cabo. Existen modelos que solo alcanzan las primeras ramificaciones (Zhang, Kleinstreuer, Kim, 2001; Zhang, Kleinstreuer, 2002; Liu et al., 2002). Otros utilizan modelos de transmisión 1D (Ma, Lutchen, 2006). Hay modelos que han usado simulaciones secuenciales de secciones consecutivas del pulmón (Nowak, Kadake, Annapragada, 2003; Zhang, Kleinstreuer, Kim, 2008) o de un reducido número de caminos del flujo (Gemci et al., 2008; Walters, Luke, 2010).

La descripción de la geometría del pulmón humano es una tarea complicada dada la complejidad de su morfología. Las vías aéreas pulmonares humanas están comprendidas por repetidas bifurcaciones dicotómicas dando como resultado una red de ramas de una complejidad significativa. Las redes de flujo con múltiples ramas geométricamente complejas son comunes en la naturaleza debido a su efectividad a la hora de distribuir un flujo central sobre una gran área.

Uno de los modelos de geometría más usados es el conocido como modelo de Weibel (Weibel, 1963). El modelo presenta el árbol bronquial como una sucesión de divisiones dicotómicas regulares de cada rama principal. El modelo completo se representa por 24 generaciones (siendo denominada la tráquea como generación 0). Según este modelo el número de conductos aumenta exponencialmente. De esta forma habría una vía aérea de orden 0 ($2^0=1$), 2 vías de orden 1 ($2^1=2$), 4 de orden 2 ($2^2=4$), y por tanto 224 vías de orden 24. Las ramificaciones hasta la generación 16 constituyen las vías aéreas conductoras mientras que a partir de ahí, estando ya más o menos alveoladas se denomina zona respiratoria del pulmón. Se han seguido las pautas del modelo presentado por Kitaoka (Kitaoka, Takaki,

Suki, 1999) en el que cada nueva generación se encuentra en un plano perpendicular al que contiene su generación precedente (Fig. 1).

Fig. 1. Generación de la geometría según el modelo de Kitaoka.



2. Objetivos

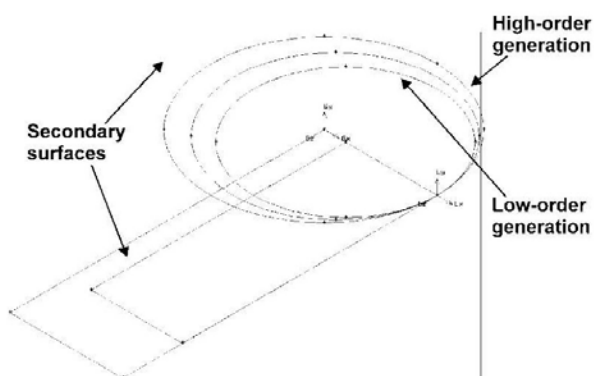
En este artículo se expone una metodología general con el objetivo de crear un modelo geométrico del pulmón humano desde la tráquea hasta la región alveolar (zona conductiva del pulmón). La metodología, basada en la morfología propuesta por Weibel (1963), presta especial atención a la forma en cómo se dividen las vías aéreas. El principal objetivo es desarrollar una morfología simplificada del pulmón que permita posteriormente trabajar sobre ella para resolver el flujo evitando tamaños de malla imposibles y por tanto reduciendo tiempos de proceso. Sacando partido de la simetría del modelo basado en el de Weibel (1963), se trata de desarrollar un único camino desde la tráquea hasta la generación 16. Es decir, en cada bifurcación se opta por calcular el flujo a lo largo de una de las dos posibles ramas y se impone en la otra el perfil de velocidad de la rama simulada como condición de contorno gracias a una UDF (User Defined Function) programada en Fluent ®. Este código comercial resuelve en el modelo las ecuaciones de Navier-Stokes conjuntamente con el modelo de turbulencia k-epsilon.

3. Metodología

Se ha desarrollado el modelo de pulmón basada en el modelo propuesto por Weibel (1963) con el software Gambit ® entre las generaciones 0 y 16. Se excluye por tanto la zona conductiva superior hasta la tráquea y la zona alveolar.

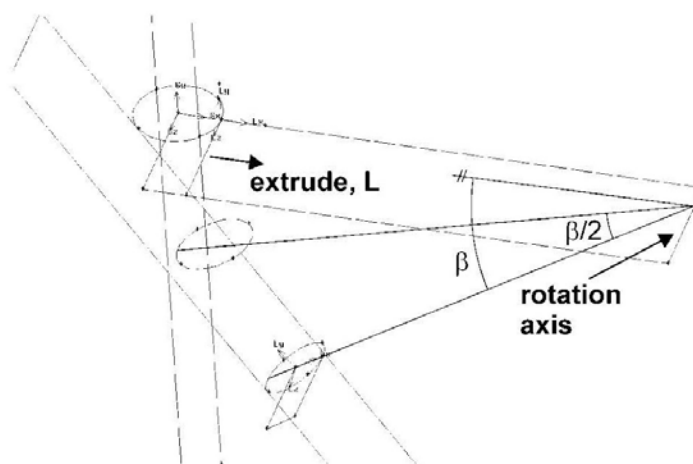
Todos los bronquiolos y sus bifurcaciones están generados de forma similar. En primer lugar se dibujan tres círculos en un plano horizontal que corresponden a los diámetros de la generación de orden mayor, la de orden inmediatamente inferior a esta y uno intermedio entre ambos, tal y como se representa en la Fig. 2. Se crean también en este paso una serie de planos auxiliares tanto en el plano de los círculos como en un plano medio perpendicular a los mismos. Estos planos tendrán funciones de plano de simetría, corte, y algunas de sus aristas extremas servirán como ejes de giro.

Fig. 2. Diámetros en la bifurcación.



Los círculos están divididos en 4 arcos iguales obteniendo los puntos de apoyo para las caras frontales, laterales y traseras de la bifurcación. Extruímos el lado mayor de una de las superficies creadas en el plano de los círculos una longitud igual al radio de curvatura de la bifurcación, de forma que la arista más alejada servirá como eje de giro para los círculos. La otra superficie será girada con el círculo menor un ángulo β de manera que en un paso posterior será usada para crear un nuevo eje de giro tras ser extruída. Igualmente se gira el círculo intermedio un ángulo $\beta/2$. El resultado puede verse en la Fig. 3.

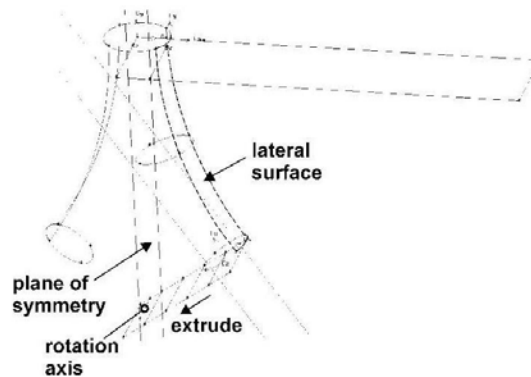
Fig. 3. Camino en la bifurcación desde la generación de orden superior a la de menor orden.



Ya es posible dibujar los arcos en que se apoyan las superficies laterales utilizando puntos de los círculos segmentados (arco por 3 puntos). Con estos arcos y los comprendidos entre dos puntos de cada círculo se crea la superficie lateral (Fig. 4).

Se utiliza el plano de simetría para reproducir los elementos creados. De esta forma tendremos la superficie lateral izquierda. Extruímos la superficie abatida con el círculo menor de manera que corte el plano de simetría. La arista de corte servirá de eje de rotación para crear la superficie inferior de la bifurcación. El arco más bajo del círculo es revolucionado con respecto a ese eje hasta unirse con su simétrico.

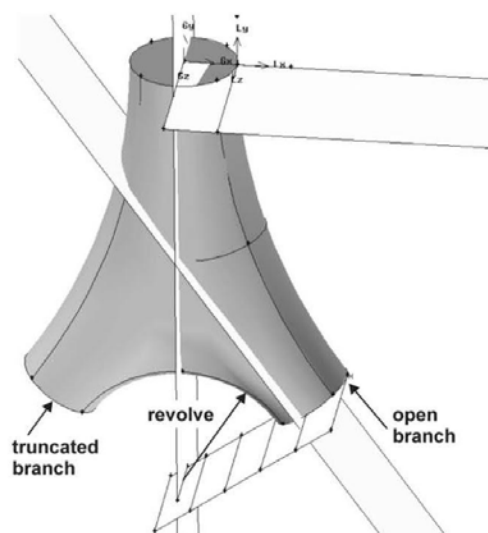
Fig. 4. Generación de las superficies laterales de la bifurcación.



Finalmente, y apoyándonos en la geometría creada hasta ahora, se crean las superficies frontal y trasera de la bifurcación, cerrando un volumen con el que se creará el sólido que representa el volumen fluido encerrado en la misma (Fig. 5).

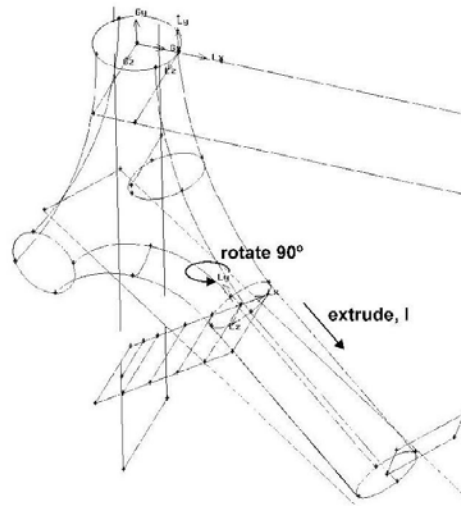
Como se explicó desde un principio la idea es conseguir un modelo lo más realista posible pero que al mismo tiempo nos permita tener tiempos de proceso asumibles. Esto se consigue desarrollando solo una de las dos posibles ramas de cada bifurcación. Por lo tanto, una de las ramificaciones no se desarrollará para el siguiente paso en lo que a geometría se refiere.

Fig. 5. Geometría de la bifurcación.



El último paso será por tanto crear la geometría del bronquiolo. Para ello se extruye el círculo correspondiente al mismo (el otro quedaría truncado) en una dirección normal al mismo (Fig. 6). La superficie que trasladamos con el círculo menor, es copiada al final de este bronquiolo y girada respecto a su eje 90° obteniendo la situación inicial.

Fig. 6. Generación de la nueva rama.

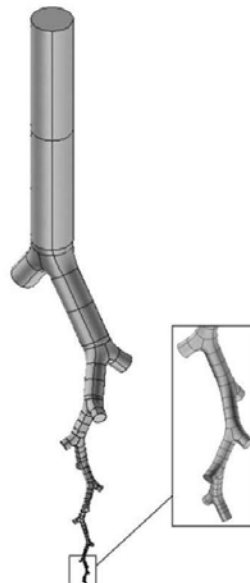


Para continuar desarrollando el modelo simplemente tendremos que repetir los pasos descritos variando radios y longitudes hasta alcanzar la zona alveolar (generación 16).

4. Resultados

En la figura. 7 puede verse la morfología completa del pulmón descrita de esta forma.

Fig. 7. Modelo numérico del pulmón.



En la Tabla 1 se presenta un resumen de las principales dimensiones de cada rama por generaciones. El diámetro d y la longitud l fueron obtenidas de las relaciones propuestas por Weibel (1963):

$$\begin{cases} d = 0.018 \exp(-0.388 n) & \text{if } n \leq 3 \\ d = 0.013 \exp[-(0.2929 - 0.00624 n) n] & \text{if } n > 3 \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} l = 0.12 \exp(-0.92 n) & \text{if } n \leq 3 \\ l = 0.025 \exp(-0.17 n) & \text{if } n > 3 \end{cases} \quad (2)$$

Tabla 1. Principales parámetros del modelo.

n	Branches	d (m)	l (m)	A (m ²)
0	1	0.01800	0.12000	2.545E-04
1	2	0.01221	0.04782	1.171E-04
2	4	0.00828	0.02485	5.390E-05
3	8	0.00562	0.01686	2.481E-05
4	16	0.00445	0.01267	1.556E-05
5	32	0.00351	0.01069	9.692E-06
6	64	0.00281	0.00901	6.189E-06
7	128	0.00227	0.00761	4.052E-06
8	256	0.00186	0.00642	2.720E-06
9	512	0.00154	0.00541	1.872E-06
10	1024	0.00130	0.00457	1.321E-06
11	2048	0.00110	0.00385	9.556E-07
12	4096	0.00095	0.00325	7.088E-07
13	8192	0.00083	0.00274	5.391E-07
14	16384	0.00073	0.00231	4.203E-07
15	32768	0.00065	0.00195	3.360E-07
16	65536	0.00059	0.00165	2.754E-07
17	131072	0.00054	0.00139	2.314E-07

A partir del modelo anterior es posible obtener la morfología completa del pulmón gracias a la condición de simetría del modelo. En la figura 8, podemos ver una muestra del modelo completo de pulmón a estudiar. Intentar recrear el flujo de aire en el modelo completo no es abordable y es por lo que es útil este modelo simplificado.

Fig. 8. Morfología completa del pulmón.



Sin embargo, la representación completa del pulmón puede tener otras aplicaciones gráficas. Por ejemplo, es posible obtener secciones del mismo representando en ellas las superficies que corresponde a cada una de las generaciones. Esta información es muy útil a la hora de compararlas con los datos de imágenes SPECT (Single Photon Emission Computed Tomography) y discernir en que generaciones quedan depositadas un determinado tipo de

partículas. En las figuras 9 a 11 pueden verse la representación de las distintas generaciones del modelo así como un ejemplo de sección del mismo.

Fig. 9. Vistas de una parte del pulmón representando en color las distintas generaciones.

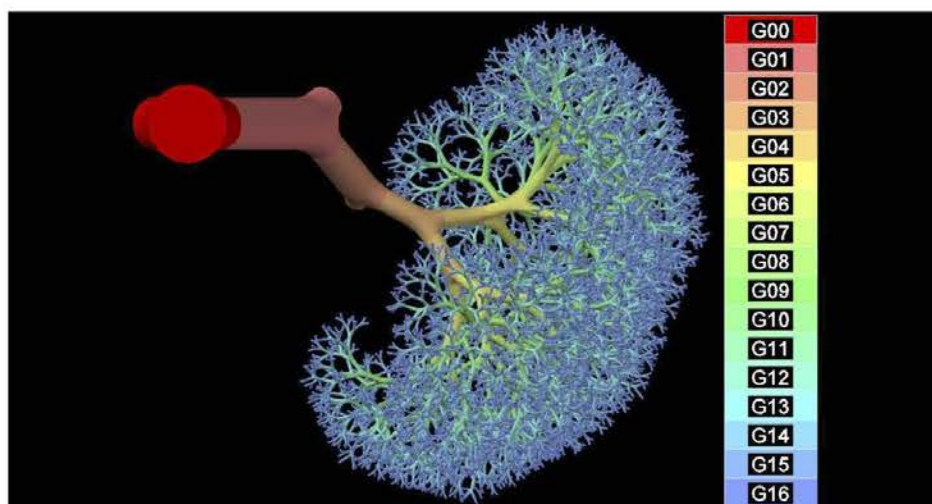


Fig. 10. Alzado de parte del pulmón para representar distintos planos de corte

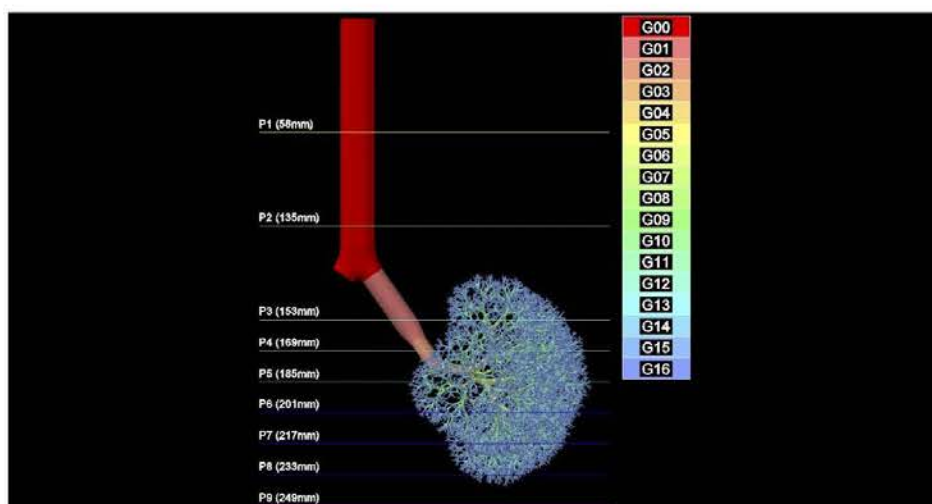
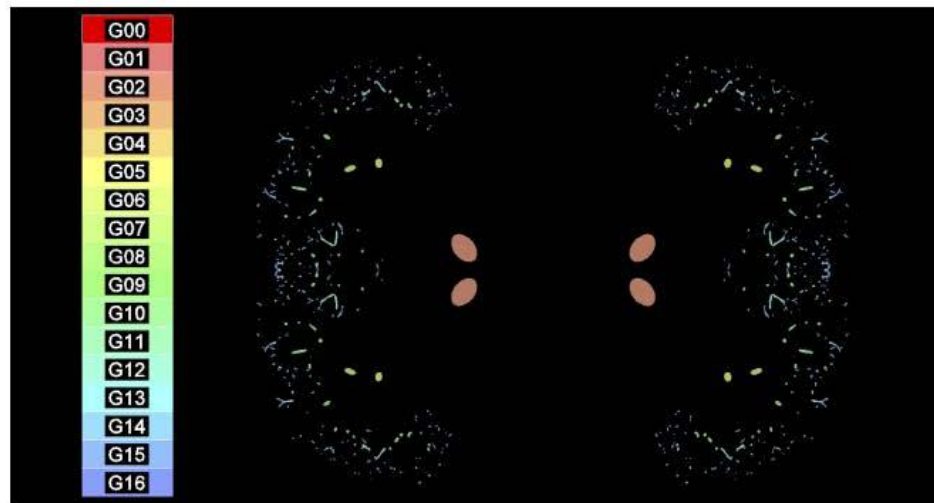


Fig 11. Ejemplo de sección del pulmón completo (P4).



5. Conclusión

Este artículo ha expuesto una nueva metodología para crear un modelo numérico del pulmón humano para que pueda ser usado en simulaciones numéricas. El principal objetivo del modelo fue representar la zona conductiva del pulmón (generaciones 0 a 16) mediante un método que suponga un ahorro de tiempo de computación.

Con este propósito, solo se tuvo en cuenta uno de los dos caminos posibles en cada bifurcación tanto para el modelado como para la correspondiente simulación.

Por el mismo procedimiento es posible representar el pulmón por completo, no solo un único camino, con el objetivo de tener una vista general del mismo y poder obtener secciones completas de mismo para su estudio.

6. Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación de la Junta de Extremadura y FEDER mediante el proyecto GR10047 y también al Ministerio de Ciencia e Innovación mediante el proyecto DPI 2010-21103-C04-04.

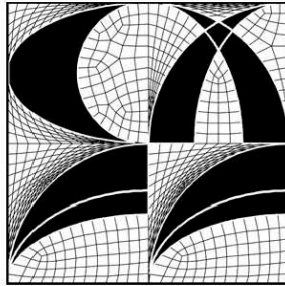
7. References

- Burton, R. T., Isaacs, K. K., Fleming, J. S., Martonen, T. B., 2004, "Computer Reconstruction of a Human Lung Boundary Model From Magnetic Resonance Images". *Respiratory Care*, 49(2), pp. 180-185.
- Fluent® version 6.3.26, 2006, ©ANSYS Inc. All Rights Reserved.
- Gambit® version 2.4.6, 2006, ©ANSYS Inc. All Rights Reserved.
- Gemci, T., Ponyavin, V., Chen, Y., Chen, H., Collins, R., 2008, "Computational Model of Air-flow in Upper 17 Generations of Human Respiratory Tract". *Journal of Biomechanics*, 41(9), pp. 2047-2054.
- Kitaoka, H., Takaki, R., Suki, B., 1999, "A Three Dimensional Model of the Human Airway Tree". *Journal of Applied Physiology*, 87(6), pp. 2207-2217.

- Liu, Y., So, R. M. C., Zhang, C. H., 2002, "Modeling the Bifurcating Flow in a Human Lung Airway". *Journal of Biomechanics*, 35(4), pp. 465-473.
- Ma, B., Lutchen, K. R., 2006, "An Anatomically Based Hybrid Computational Model of the Human Lung and Its Application to Low Frequency Oscillatory Mechanics". *Annals of Biomedical Engineering*, 34(11), pp. 1691-1704.
- Nowak, N., Kadake, P. P., Annapragada, A. V., 2003, "Computational Fluid Dynamics Simulation of Airflow and Aerosol Deposition in Human Lungs". *Annals of Biomedical Engineering*, 31(4), pp. 374-390.
- Sera, T., Fujioka, H., Yokota, H., Makinouchi, A., Himeno, R., Schroter, R. C., Tanishita, K., 2003, "Three-Dimensional Visualization and Morphometry of Small Airways From Microfocal X-Ray Computed Tomography". *Journal of Biomechanics*, 36(11), pp. 1587-1594.
- Walters, D. K., Luke, W. H., 2010, "A Method for Three-Dimensional Navier-Stokes Simulations of Large-Scale Regions of the Human Lung Airway". *Journal of Fluids Engineering*, 132(5), 01-1 to 01-8.
- Weibel, E. R. *Morphometry of the human lung*. Springer-Verlag, 1963.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C., 2002, "Transient Airflow Structures and Particle Transport in a Sequentially Branching Lung Airway Model". *Physics of Fluids*, 14(2), pp. 862-880.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C., Kim, C. S., 2008, "Airflow and Nanoparticle Deposition in a 16-Generation Tracheobronchial Airway Model". *Annals of Biomedical Engineering*, 36(12), pp. 2095-2110.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C., Kim, C., 2001, "Flow Structure and Particle Transport in a Triple Bifurcation Airway Model". *Journal of Fluids Engineering*, 123(2), pp. 320-330.

Correspondencia (Para más información contacte con):

E-mail: acmarcos@unex.es



CONFERENCE ON
MODELLING FLUID FLOW
CMFF'12
SEPTEMBER 4-7, 2012

THE 15th EVENT OF INTERNATIONAL CONFERENCE SERIES
ON FLUID FLOW TECHNOLOGIES HELD IN BUDAPEST

CONFERENCE PROCEEDINGS

CD-ROM

EDITED BY
J. VAD

DEPARTMENT OF FLUID MECHANICS
BUDAPEST UNIVERSITY OF TECHNOLOGY AND ECONOMICS

2012

**Proceedings of the Conference on Modelling Fluid Flow
Budapest University of Technology and Economics, Hungary 2012**

Edited by J. Vad

Copyright © Department of Fluid Mechanics,
Budapest University of Technology and Economics
and the Authors

All Rights Reserved

No part of the material protected by this copyright may be reproduced or utilized in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or by any storage or retrieve system, without written permission from the copyright owner.

CD-ROM ISBN 978-963-08-4588-5

Published by the Department of Fluid Mechanics
Budapest University of Technology and Economics
H-1111 Budapest, Bertalan L. u. 4-6., Hungary
Tel: +36 1 463 40 72
Fax: +36 1 463 34 64
e-mail: vad@ara.bme.hu
www.ara.bme.hu

trachea is divided into two main bronchus. Then each bronchi continue to divide in a dichotomous way, reaching a minimum of 23 generations. Generations 1, 2 and 3 are called bronchi. Generations 4 to 16 are the bronchioles. The latter is called the terminal bronchiole and it is the smallest portion of the airways devoid of alveoli.

The basic objective of the experimental and numerical studies of flow in the lungs is to deepen in the knowledge of the gas exchange (O_2 and CO_2) and in the particle deposition, and optimize the application of pharmaceutical aerosols for the treatment of lung diseases. The deposition of aerosols in the lungs is a non-stationary phenomenon due to the complexity of the lungs' geometry, the existence of interactions between air, water and solids, the cells' mechanics and heat transfer. This means that the velocity, density, pressure or temperature can change over time. Not all phenomena occurring in the lungs' airways can be simulated. Experimental and numerical simplifications are needed, such as considering the airflow as isothermal, rigid ducts (which would be the bronchi), and a spherical shape of the particles.

The earlier studies of particle deposition were based on one-dimensional models based on empirical formulas. One of the pioneering researchers in this field was Martonen [1-2], who proposed in 1982 a system of equations to determine the particle deposition. For its formulation took into account a number of assumptions such as the behaviour of particles in the lung (that are deposited by impaction, sedimentation and diffusion) and the velocity of air in the lungs in function of tidal volume and respiratory rate. In the larger particles the impaction behaviour predominates, while in the smaller ones diffusion is the main behaviour. The intermediate particles tend to deposit by sedimentation because of the effect of gravity.

For over a decade, several studies about the airflow behaviour were performed, starting in the mouth and ending in the alveolar region [3-6]. These studies have mainly focused on isolated sections of the lung, such as the trachea and the first generations of alveolar ducts or sacs.

Current studies are based predominantly in Computational Fluid Dynamics (CFD). Increased computer power has allowed the development of this technique, in which the Navier-Stokes equations are solved in the domain under study. Walters [7] uses a model with a finite number of flow paths, each of which is fully resolved, to provide a detailed description of the entire complex small-scale flowfield. This model was tested for three inspiratory flowrates and compared in terms of pressure drop, flow distribution characteristics, and flow structure with the fully resolved geometry. Robinson [8, 9] focuses her work in studying the three main modes of particle deposition (impact, sedimentation and diffusion) using simplified ducts.

The techniques of imaging (e.g., SPECT) can detect with a high degree of resolution the deposition patterns of particles, but not clearly the airway composition. Martonen [10] shows a protocol to aid in the interpretation of these images, where the interior of lung was partitioned into a series of nested shells, each one containing its part of the airways, helping the interpretation of scintigraphy images. To our knowledge, the use of CFD in Spain has been only developed in the Universidad Autónoma de Madrid [11] and in the Universidad de Valladolid [12], although both cases were limited to the upper airways.

This work is part of a broader one, which tries to model the airflow in the lung with all their characteristics: unsteady flow, inhalation and exhalation of particles, common diseases (asthma, bronchitis, etc.). A first step was [13] the construction and simulation of a particular 7-level model, using a single way to study the unsteady flow that occurs during the execution of a spirometry test. The main innovation was the unsteady boundary conditions applied in conjunction with an adaptive time step. Such conditions required the use of two UDF. The fluid dynamic phenomenon of different obstructive diseases, and how it is perceived in the tests, was characterized varying the geometry and the unsteady boundary conditions.

A second step of the investigation is the main objective of this work, to study the lung deposition of inhaled particles through a numerical model. To achieve the overall objective we have established the following specific objectives:

- Preparation of a geometrical model of human airway.
- Preparation of numerical model to determine the airflow through the airway.
- Determining the transport and deposition of particles under different conditions of speed and particle sizes.

2. METHODOLOGY

A 3D numerical model of the bronchial tree has been developed, from the trachea to the seventh level bronchioles with the commercial code Ansys Gambit© [14]. The geometry follows the models developed by Weibel [15] and Kitoaka et al [16].

This model begins at the trachea, which has a length of 12 cm and a diameter of around 1.8 cm. The right main bronchus is shorter and wider. It leaves the trachea with an angle of 25 to 30 degrees, with a diameter of approximately 1.5 cm and a length of 2 cm. The left main bronchus leaves the trachea with an angle of approximately 45 degrees. It is substantially longer than the right main bronchus, with an average length of 5 cm and a diameter of 1.2 cm. Levels 2 and 3 are made with Kitoaka recommendations [16] and the rest following Weibel [15]. The bifurcation angle β was set to 35°

according to the guidelines given in [15]. The dimensions of the built model can be seen in table 1.

Table 1. Model dimensions

Gen n	Branches number	Diam (m)	Lengh (m)	Area (m ²)
0	1	0.01800	0.12000	2.54E-08
1	2	0.01221	0.04782	1.17E-08
2	4	0.00828	0.01906	5.39E-09
3	8	0.00562	0.00760	2.56E-09
4	16	0.00445	0.01267	1.56E-09
5	32	0.00351	0.01069	9.69E-10
6	64	0.00281	0.00901	6.19E-10
7	128	0.00227	0.00761	4.05E-10

The geometry of the bifurcations in the bronchioles at all the generations is created by a similar procedure. The diameter d and the length ℓ , deduced from the relations proposed by Weibel and Kitaoka, are:

$$\begin{cases} d = 0.018 \exp(-0.388 n) & \text{if } n \leq 3 \\ d = 0.013 \exp[-(0.2929 - 0.00624 n) n] & \text{if } n > 3 \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} l = 0.12 \exp(-0.92 n) & \text{if } n \leq 3 \\ l = 0.025 \exp(-0.17 n) & \text{if } n > 3 \end{cases} \quad (3)$$

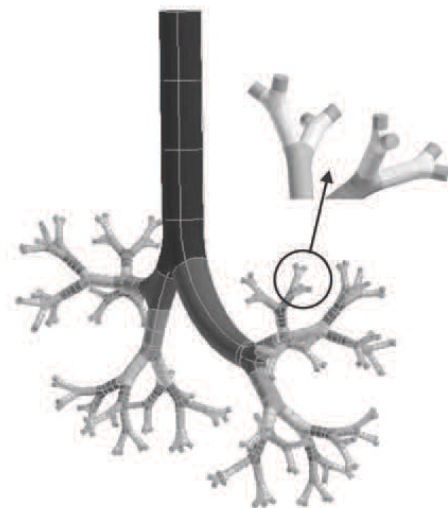


Figure 1. Numerical model geometry from the trachea to the 7th order bronchioles

Figure 1 shows a global image of the model. The complete morphology of the lung can be generated from this model by imposing symmetry at each of the branches. The entire lung is presented in

Figure 2 for showing purposes only; of course, the numerical simulation of this complete morphology would be simply unavoidable.

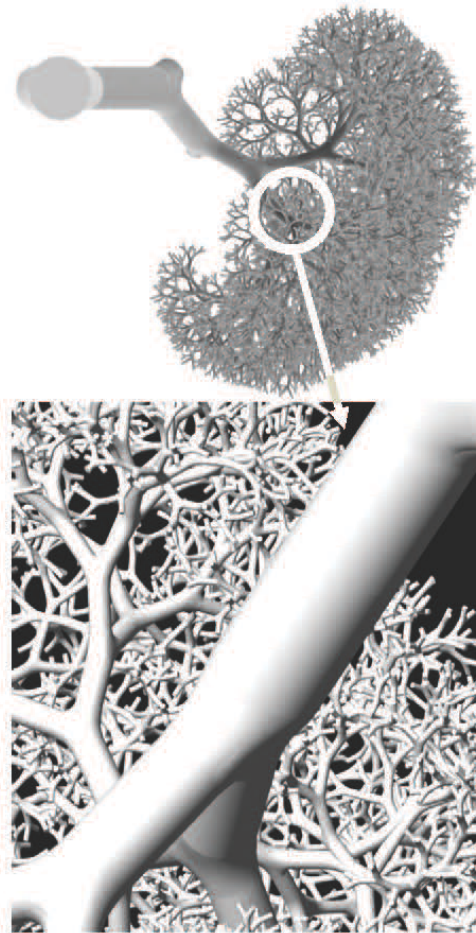


Figure 2. Complete morphology of the lung

Figure 3 shows a detail of the unstructured mesh generated. The model of the lung was meshed with tetrahedral cells due to their better adaptation to complex geometries. The size of the tetrahedrons diminishes while descending from the high-order to the low-order generations. A boundary layer mesh was built before meshing the volumes in order to obtain a better description of the boundary layer in the numerical calculations. The size of the tetrahedrons was consistent with the size of the boundary layer cells. The volume of the cells ranges between 2.96×10^{-12} and 2.01×10^{-10} . The maximum equiangle skew was restricted to 0.6 for 97.60% of the cells in the mesh.

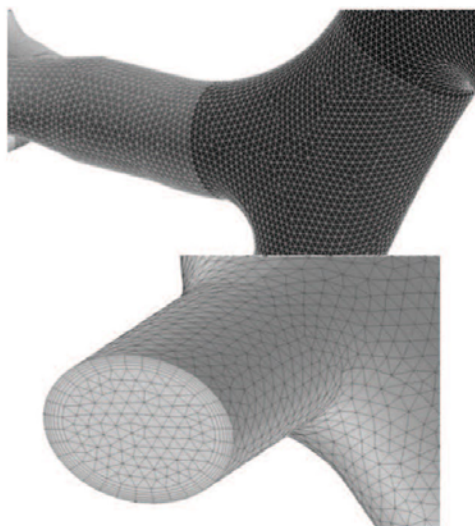


Figure 3. Detail of the mesh

The total number of cells used to begin the simulations was about 10^6 , though other meshes of different size (2×10^6 and 4×10^6) were generated in order to investigate the dependence of the numerical predictions. As can be seen in Figure 4, the variation observed in the outlet static pressure rate when considering different mesh sizes is not very significant. For the mesh size used for the calculations (about 1,000,000 cells) this variation is lower than 1.77%, and with 2,000,000 cells is lower than 1.04% compared with the model of 4,000,000 cells.

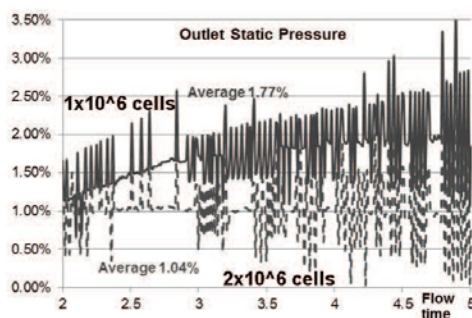


Figure 4. Results of the independence tests

The numerical simulations were performed with the code Ansys Fluent© [17]. This code was used to solve the full steady 3D Reynolds-averaged Navier-Stokes equations by the finite volume method. The fluid used in the calculations was air. The velocities will vary between 0.4 and 8 m/s, so the Reynolds number is between 4.93×10^2 and 9.83×10^3 . The flow was considered as incompressible and turbulent. To effectively address both lami-

nar and turbulent flow conditions, the model used for turbulent closure was the SST k- ω together with the transitional flows option to enable a low-Reynolds-number correction to the turbulent viscosity. This model provides a good approximation to transitional flows because the value of ω does not reach the zero value as the laminar flow limit is approached. Furthermore, the turbulence is simulated all the way to the viscous sublayer, avoiding the use of standard wall functions, which are inaccurate for transitional flows. The pressure-velocity coupling was established by means of the SIMPLE algorithm. Second-order upwind discretizations were used for the convection terms and central difference discretizations were established for the diffusion terms. The y^+ values were maintained to be on the order of approximately 2 or less at all wall boundaries.

This model has already been tested in the first step of this broad work [13].

The particle trajectory equation can either be solved with the momentum and energy equation for the continuum flow (coupled) or after the momentum and energy equations have converged (uncoupled). The coupled option allows particles to interact with the flow fluid and affect the flow solution. In this case, the uncoupled option was chosen. The inlet boundary condition was mass flow rate, and the outlet boundary condition was pressure outlets. Each of the 128 terminal airway branches were held constant at atmospheric pressure, instead of constant outflow, since the flow rate in the branches is allowed to vary. Convergence was accepted with a criteria of 0.00001 residuals for continuity and each velocity component in the momentum equation. Convergence required about 1,600 iterations and approximately 10 min CPU time.

Once the static simulation has finished, the Discrete Phase Model (DPM) is switched on to predict the trajectory of discrete phase particles. To study particle deposition, the Lagrangian approach was used; particle trajectories were calculated within the steady flow fields of interest as a post processing step. Forces on the particles of interest include drag, pressure gradient, gravity, lift, and Brownian motion. To model the effects of turbulent fluctuations on particle motion, a random walk method has been employed. The tracking parameters used were 50,000 for the "maximum number steps" and 5 for the "step length factor".

Particles are introduced by means of an injection type called surface, specifying particle properties and velocity. The particles must be introduced from a surface close to the entrance (0.1 mm) and not near the walls (0.5 mm) to avoid the immediate deposition. Robinson [18] founded that 50,000 particles are necessary to minimize random variation in the deposition efficiency predictions due to the randomness of the particle position profile. Figure 5 shows the spatial distribution of particles

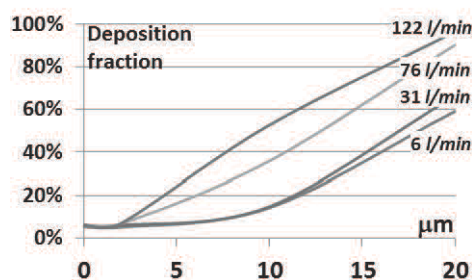


Figure 8. Relationship between particle size and lung deposition. Numerical results.

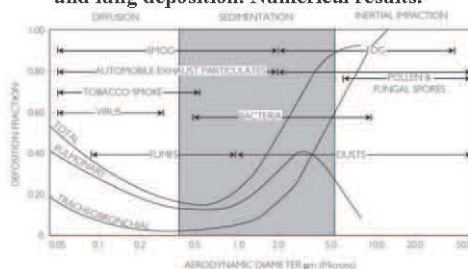


Figure 8. Relationship between particle size and lung deposition. Experimental results (Dolovich et al.).

Figures 9 to 14 show the concentration of the particles (kg/m^3) settled on the duct walls for a flow rate of 31 ℓ/min and for all size of particles. Black colour with white border means “high concentration” of settled particles on the wall, and gray colour means absence of settled particles. It can be

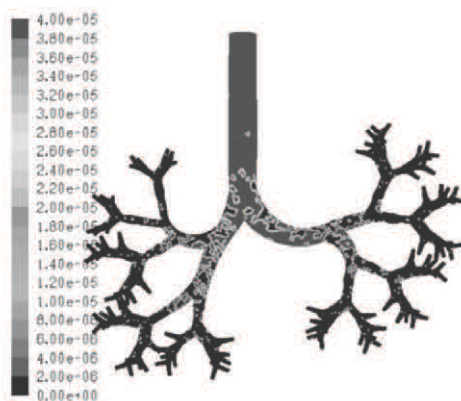


Fig. 9: Flowrate 31 ℓ/min , size 1 μm

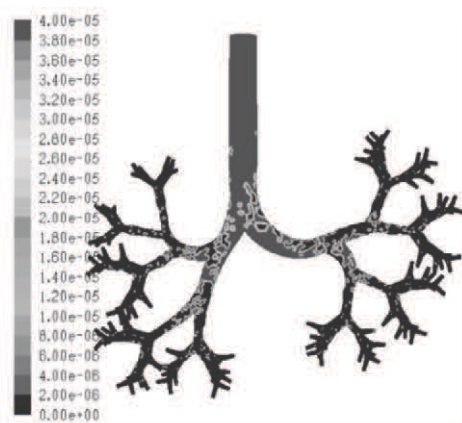


Fig. 10 Flowrate 31 ℓ/min , size 1 nm

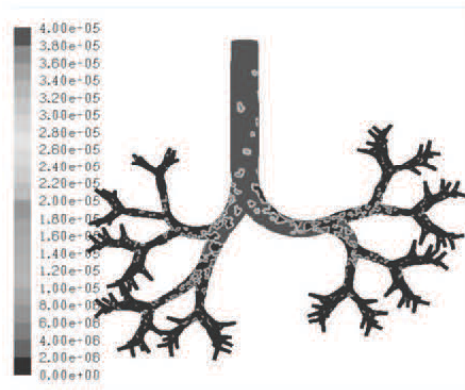
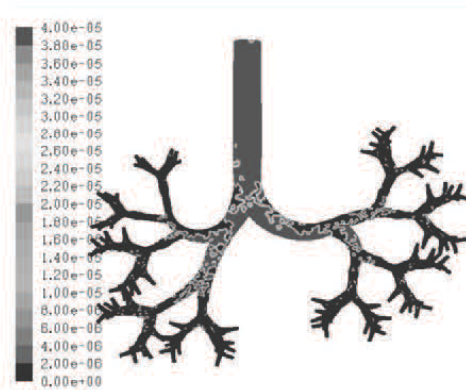
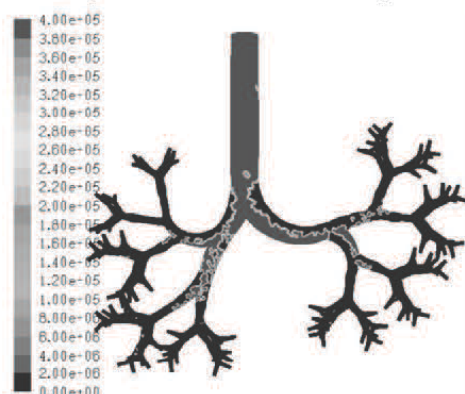
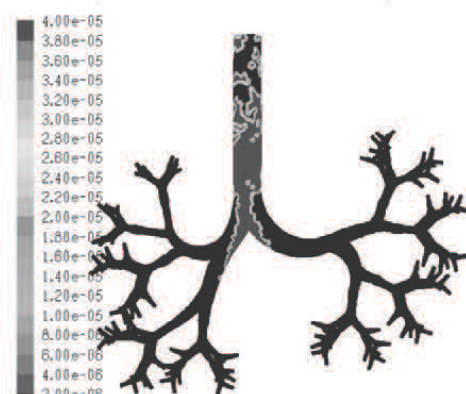
observed that the number of escaped particles decreases when the particle size increases. This is due to the gravitational force, which also increases, forcing the particles to settle on the walls. In these figures it also can be observed that the black areas reach more distant regions as the particles are smaller.

4. CONCLUSIONS

The distribution of particles in the lung airways depends of its size. Small particles are distributed more uniformly than bigger particles, which follow the mean flow. The main objective of this work, to study the particle transport in the lung from the trachea to level 7 has been achieved. The next step is a combination of this work with the previous one. We will try to determine the particle deposition from the mouth to the level 17 during a respiratory cycle, using a mixture of particles of different sizes. Due to the high number of branches (131,072), it is necessary to work with a single pathway, so the boundary conditions applied in the truncated branches will be very important.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors gratefully acknowledge the financial support provided by Junta de Extremadura and FEDER under project GR10047 and also by Ministerio de Ciencia e Innovación under project DPI 2010-21103-C04-04.

Fig. 11: Flowrate 31 ℓ/min , size 1 μm Fig. 12: Flowrate 31 ℓ/min , size 5 μm Fig. 13: Flowrate 31 ℓ/min , size 10 μm Fig. 14: Flowrate 31 ℓ/min , size 50 μm

REFERENCES

- [1] Martonen TB. Analytical model of hygroscopic particle behavior in human airways. *Bull Math Biol.* 1982; 44:425–442.
- [2] Martonen TB, Katz I. Inter-related effects of morphology and ventilation on drug deposition patterns. *STP Pharm Sci.* 1994; 4:11–18.
- [3] Adler K, Brucker C. Dynamic flow in a realistic model of the upper human lung airways. *Exp. Fluids.* 2007; 43:411–23.
- [4] Ball CG, Uddin M, Pollard A. High resolution turbulence modelling of airflow in an idealised human extrathoracic airway. *Comput. Fluids.* 2008; 37:943–64.
- [5] Gemci T, Ponyavin V, Chen Y, Chen H, Collins R. Computational model of airflow in upper 17 generations of human respiratory tract. *J. Biomech.* 2008; 41:2047–54.
- [6] Zhang Z, Kleinstreuer C, Kim CS. Airflow and nanoparticle deposition in a 16-generation tracheobronchial airway model. *Ann. Biomed. Eng.* 2008; 36:2095–110.
- [7] D. Keith Walters and William H. Luke, A Method for Three-Dimensional Navier-Stokes Simulations of Large-Scale Regions of the Human Lung Airway. *J. Fluids Eng.* 132, 051101, 2010, vol. 132, 051101-1-8.
- [8] Robinson, RJ., Snyder, P., Oldham MJ. Comparison of Particle Tracking Algorithms in Commercial CFD Packages: Sedimentation and Diffusion. *Inhalation Toxicology*, 19:517–531, 2007.
- [9] Robinson, RJ., Snyder, P., Oldham MJ. Comparison of Analytical and Numerical Particle Deposition Using Commercial CFD Packages: Impaction and Sedimentation. *Inhalation Toxicology*, 20:485–497, 2008.
- [10] Martonen T. B, Schroeter, J.D., Fleming J.S. 3D In Silico Modeling of the Human Respiratory System for Inhaled Drug Delivery and Imaging Analysis. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, Vol. 96, 603–617, 2007.

- [11] Castro Ruiz Pilar. *Análisis computarizado del flujo aéreo en cavidad nasal. Tesis Doctoral*. Universidad Autónoma de Madrid. 2003.
- [12] Quispe Apacella César, 2010. *Estudio del flujo de aire a través de las fosas nasales en la inspiración y espiración, considerando el intercambio de calor existente. Tesis Doctoral*. Universidad de Valladolid.
- [13] Tena, Ana T, Casan, P, Marcos, A, Barrio, R, Blanco, E, 2011. Analysis of the fluid dynamic characteristics of the obstructive pulmonary diseases using a three-dimensional cfd model of the upper conductive zone of the lung airways. *Proceedings of the ECCOMAS. Conference on Simulation and Modeling of Biological Flows, VUB, Brussels, Belgium*.
- [14] *Gambit version 2.4.6* (2006). ©ANSYS Inc.
- [15] Weibel, E.R., *Morphometry of the human lung*, Springer-Verlag (1963).
- [16] Kitaoka H, Takaki R, Suki B. A three-dimensional model of the human tree. *J. Applied Physiology*. 1999; 87: 2207-2217.
- [17] *Fluent version 6.3.26* (2006). ©ANSYS Inc.
- [18] Robinson, R. J., Oldham, M. J., Clinkenbeard, R. E., and Rai, P. 2006. Experimental and numerical analysis of a 7 generation human replica tracheobronchial model. *Ann. Biomed. Eng.* 34(3):373–383
- [19] Dolovich MB, Newhouse MT. Aerosols. *Generation, methods of administration, and therapeutic applications in asthma. In Allergy. Principles and practice*, 4th edn, eds Middleton E Jr, Reed CE, Ellis EF, Adkinson NF Jr, Yunginger JW, Busse WW. St Louis: Mosby Year Book, Inc., 1993; 712–739.



Órgano Oficial de la Sociedad Española de Neumología y Cirugía Torácica (SEPAR),
la Asociación Latinoamericana del Tórax (ALAT)
y la Asociación Iberoamericana de Cirugía Torácica (AIACT)

Archivos de Bronconeumología

ISSN: 0300-2996

Volumen 48, Especial Congreso, Junio 2012

**45 Congreso Nacional
de la Sociedad Española de Neumología
y Cirugía Torácica (SEPAR)**

Madrid, 8-11 de junio de 2012



www.archbronconeumol.org

Incluida en: Excerpta Medica/EMBASE, Index Medicus/MEDLINE, Current Contents/Clinical Medicine, ISI Alerting Services, Science Citation Index Expanded, Journal Citation Reports, SCOPUS, ScienceDirect



108

45 Congreso Nacional de la SEPAR

sobre calidad de vida, Barthel y Goldberg. Este estudio está coordinado con Neumología y Atención Primaria e intervienen otros profesionales sanitarios (enfermería, fisioterapia, nutrición y asistente social). La centralita de triaje y la instalación de dispositivos fue realizada por Carburos Médica. Este estudio ha sido aprobado por el CEIC del H. Universitario de La Princesa.

Resultados: La edad media de la muestra fue de 77,08 años. El 90% de los pacientes tenían OCD y pertenecían al grupo IV de la GOLD. La puntuación del test de Barthel fue de 88,7 (limitación moderada), CAT 17,11, la puntuación de despistaje de depresión fue de 3,62 (positivo a partir de 2). El 70% tenían cuidador (el cónyuge en la mayoría de los casos). En el grupo caso se registraron 12 alertas clínicas, 7 de ellas por agudización de EPOC (AEPOC), de los que 1 paciente ingresó. En noviembre se registraron 20 alertas clínicas, 16 por AEPOC y 2 pacientes ingresaron, no se registraron exits en este periodo. En el grupo control hubo 10 ingresos durante el mes de octubre y 6 durante el mes de noviembre, 1 paciente ingresó en UCI y 2 de ellos requirieron VMNI. Durante el mes de octubre 1 paciente falleció. El estudio sigue abierto hasta mayo del 2012.

Conclusiones: La telemedicina es un recurso eficaz en el seguimiento de pacientes EPOC grave. Es fundamental una buena coordinación asistencial entre A. Primaria y Especializada. La enfermera gestora de caso tiene un papel relevante como primer escalón de triaje. Los pacientes del grupo TM han ingresado menos que los pacientes en los que se realiza seguimiento habitual.

MODELO TRIDIMENSIONAL DE LAS VÍAS AÉREAS PARA LA SIMULACIÓN DEL DEPÓSITO DE PARTÍCULAS INHALADAS

A. Fernández Tena¹, A. Marcos², A.I. Enríquez¹, R. Guzmán¹, H. Jiménez¹, L. Vigil¹ y P. Casan¹

¹INS-HUCA-Facultad de Medicina: Área del Pulmón. ²Universidad de Extremadura: Departamento de Mecánica de Fluidos.

Introducción: Objetivo: caracterizar el depósito pulmonar de partículas inhaladas mediante un modelo numérico de dinámica de fluidos.

Material y métodos: Se ha elaborado un modelo tridimensional del pulmón hasta la séptima generación de la vía aérea a partir del propuesto por Kitaoka et al (1999), complementado con el de Weibel (1963). Para ello se ha empleado el programa de simulación de dinámica de fluidos computacional (CFD) Ansys-Fluent. Este modelo tridimensional se ha dividido en celdas con forma de tetraedro con arista media de 0,5 mm, obteniéndose 1,5 millones de celdas, en cada una de las cuales el programa simula el movimiento del aire. El programa, una vez simulado el flujo del aire dentro del pulmón, permite calcular la trayectoria de las partículas, acorde con su velocidad, tamaño y peso. Se han simulado distintos caudales de respiración: 6, 12, 18, 24, 59 y 95 l/min, en los cuales se introdujeron partículas inertes, tipo carbón, de seis diámetros distintos: 1 pm, 1 nm, 1 µm, 5 µm, 10 µm y 50 µm. Se considera que cualquier partícula que choque contra la pared del pulmón, queda atrapada por ésta. Al final de la simulación se obtienen dos situaciones: partículas atrapadas y partículas escapadas.

Resultados: Se presentan diversas imágenes en las que las áreas en rojo indican que existe una elevada concentración de partículas atrapadas en la pared mientras que el azul oscuro indica que no hay partículas depositadas en la misma (fig. 1). Si se comparan las figuras para un mismo tamaño de partícula en los distintos caudales, se observa que las áreas rojas aumentan cuanto mayor es el caudal. Si se comparan las figuras para un determinado caudal pero distintos tamaños de partículas, se observa que las áreas rojas alcanzan zonas más periféricas cuanto menor es el tamaño de las partículas. Se comprobó además que el número de partículas atrapadas aumenta según lo hace el caudal y el tamaño de las partículas (fig. 2).

Conclusiones: La respiración lenta y con caudal bajo (por ejemplo en condiciones de reposo) hace que las partículas lleguen más lejos a través de las vías aéreas, alcanzando los alveolos. Por el contrario, la respiración con caudales altos (por ejemplo durante el ejercicio) hace que las partículas queden retenidas en la tráquea y primeras generaciones del árbol bronquial.

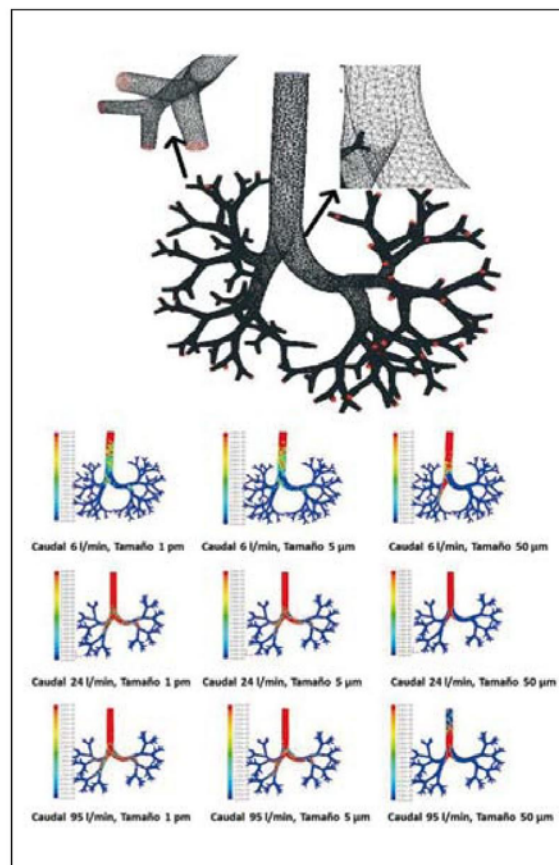


Fig. 1

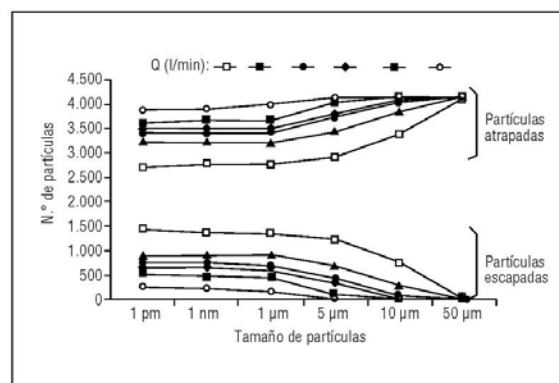


Fig. 2